Diss. München.

1912

P. P. Ewald.

Dispersion und Doppelbrechung von Elektronengittern (Kristallen).

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung der Doktorwürde

einer

hohen philosophischen Fakultät (II. Sektion)
der Königl. Ludwigs-Maximilians-Universität zu München

eingereicht am 16. Februar 1912

ACAD.
LUGD.BAT.
BIBL.

von

Peter Paul Ewald.

Göttingen 1912.
Druck der Dieterichschen Universitäts-Buchdruckerei
(W. Fr. Kaestner).

Meiner Mutter

gewidmet.

Inhalt.

Seite.

Cap. I. Das Problem und seine Behandlung.

§ 1. Aufgabe und Zweck der Arbeit 1

§ 2. Die allgemeinen Beziehungen für das Feld in einem Elektronengitter 3

§ 3. Prinzipielles über Ansatz und Rechnung 9

§ 4. Verhältnis zu anderen Theorien 13

Cap. II. Mathematischer Teil.

§ 5. Mathematische Vorbereitungen 16

§ 6. Das Gesamtfeld und das optische Feld 19

§ 7. Zweite Summation, erregendes Feld 24

Cap. III. Diskussion der Formeln, physikalische Resultate.

§ 8. Vernachlässigungen wegen der Kleinheit von $\varkappa, \varkappa_0$ 29

§ 9. Die Dispersionsformel. 32

§ 10. Die Gleichung der Normalfläche 34

§ 11. Die Doppelbrechung D 37

§ 12. Einfluß der roten Eigenschwingungen 39

§ 13. Brechungsindex eines Punktsystems 42

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548309_0065

§ 1. Aufgabe und Zweck der Arbeit.

Die Betrachtung der Symmetrieverhältnisse der Kristalle legte die Vermutung nahe, daß die Verschiedenheit der physikalischen Eigenschaften nach verschiedenen Richtungen des Kristalles sich durch die besondere Art der Anordnung der kleinsten Teilchen verstehen ließe. Unter diesem Gesichtspunkte hat zuerst Bravais eine Strukturtheorie entwickelt, welche den späteren Theorien als Grundlage diente. Ein Bravaissches Raumgitter ist die Gesamtheit von ∞^3-Punkten, deren Anordnung es gestattet, das System durch 3 nach Größe und Richtung verschiedene „Deckschiebungen" mit sich selbst zur Deckung zu bringen. Ein rhombisches Gitter wollen wir ein solches System nennen, in dem die (ungleich großen) Deckschiebungen nach drei aufeinander senkrechten Richtungen erfolgen und dessen Grundkörper ein rechtwinkliges Parallelepiped ist [1]).

Es zeigt sich, daß es nur 14 verschiedene Raumgitter gibt, die nach ihren Symmetrieverhältnissen in 7 Systeme zerfallen, welche den 7 [2]) durch die Kohäsions- und Wachstumsverhältnisse bestimmten Kristallsystemen entsprechen. Ob unter den Punkten der Raumgitter Atome oder Moleküle zu verstehen sind, bleibt durch die Symmetrieverhältnisse unentschieden. Bravais entschloß sich, um die niedrigere Symmetrie der elastischen und pyroelektrischen Erscheinungen mit der Struktur in Zusammenhang zu bringen, in den Gitterpunkten anisotrope, d. h. nach verschiedenen Richtungen verschieden ausgestattete Moleküle anzunehmen. Obwohl diese Annahme nicht von der Hand zu weisen ist, stößt man bald auf Schwierigkeiten; so z. B. bei der Erklärung des Drehungsvermögens eines optisch aktiven Natriumchloratkristalles, dessen Lösung optisch inaktiv ist und beim Verdampfen rechte und linke Kristalle hinterläßt.

1) Dies ist das einfachste der 4 Raumgitter, welche der Struktur eines Kristalles des rhombischen Systems zugrunde liegen können.

2) Hexagonales und trigonales System sind dabei gesondert gezählt.

Der Wunsch, das Drehvermögen derartiger Salze durch die Struktur selbst, nicht durch Anisotropie der Moleküle zu erklären, führte Sohnke[1]) dazu, allgemeinere Punktsysteme zu untersuchen, welche nur die durch die Homogeneität gebotene Bedingung erfüllen, von jedem Systempunkt aus genau so auszusehen, wie von jedem andern. Derartige Punktsysteme gibt es 65, die sich als Ineinanderstellungen von Bravaisschen Raumgittern auffassen lassen. Sieht man den Kristall als Ineinanderstellung mehrerer aus gleichartigen Atomen gebildeter Punktsysteme an, so werden alle beobachteten Symmetrieverhältnisse verständlich. Allgemeinere Punktsysteme sind von Schönfließ[2]) untersucht worden.

Die Strukturtheorie ist somit, was die qualitativen Fragen der Symmetrie betrifft, vollständig ausgebaut worden und es sind auch über manche physikalische Eigenschaften der Gitter (Wachstum, Spaltbarkeit) qualitative Schlüsse gezogen worden (Curie, Friedel, Mallard). Neben dem weiteren Ausbau des Zusammenhanges zwischen Struktur und chemischer Konstitution, welcher von Groth erfolgreich in die Wege geleitet wurde, fehlt vor allem die *quantitative Anwendung* der Gittervorstellung zur Berechnung der Anisotropie physikalischer Eigenschaften. Zur Prüfung empfiehlt sich hierbei der in isotropen Körpern theoretisch gut bekannte Vorgang der Ausbreitung einer ebenen Lichtwelle, der durch die zwei Größen Geschwindigkeit und Dämpfung der Welle bestimmt ist.

Im folgenden wird daher der Versuch gemacht, die optischen Konstanten für ein rhombisches Raumgitter zu berechnen, in dessen Gitterpunkten schwingungsfähige Elektronen liegen. Diese sind „isotrop" gelagert, d. h. die elastische Bindung, welche sie in die Gleichgewichtslage zurückzieht, soll für Verschiebungen nach allen möglichen Richtungen gleich groß angenommen werden.

Es wäre verfehlt, von einer Untersuchung, die ein so einfaches Bild als Grundlage der Rechnung benutzt, zu erwarten, daß ihre Resultate, z. B. die erhaltene Doppelbrechung, zahlenmäßig übereinstimmen mit den am Krystall beobachteten Größen. Der wirkliche Kristall besteht nicht aus einem einfachen Gitter, sondern aus einem Punktsystem. Er enthält nicht nur negative Elektronen, sondern auch positive Ionen, deren Mitschwingen von Einfluß auf die Ausbreitung, namentlich des langwelligen Lichtes ist. Schließlich ist es möglich, daß zu der rein strukturellen noch

1) L. Sohnke, Entwicklung einer Theorie der Kristallstruktur, Leipzig 1879.
2) A. Schönfließ, Kristallsysteme und Kristallstruktur, Lpzg. 1891.

eine durch anisotrope Bindung der Elektronen im Molekül bedingte Doppelbrechung hinzutritt.

Der *Nutzen der Untersuchung* des einfachen Gitters besteht darin, qualitativen Aufschluß über die optischen Eigenschaften regelmäßiger Anordnungen von Elektronen zu geben, z. B. die Abhängigkeit des Brechungsindex von der Ausbreitungsrichtung festzustellen. Ferner muß durch zahlenmäßige Rechnung die *Größenordnung der strukturellen Doppelbrechung* gewonnen werden, sodaß ein Urteil darüber möglich wird, ob die Struktur allein zur Erklärung der beobachteten Effekte ausreicht. Hat man sich aus anderen Betrachtungen ein detailliertes Bild irgend eines Kristalles gemacht, so wird die Berechnung der optischen Eigenschaften dieses Modelles die Entscheidung über die Zulässigkeit des Modelles abzugeben vermögen.

Auch für den Fall, daß man es zweckmäßig finden sollte, eine anisotrope Bindung der Kristallelektronen anzunehmen, ist es notwendig, den reinen Lagerungseffekt zu kennen wie er hier untersucht wird. Sonst lassen sich aus den Beobachtungen keine Schlüsse auf die Anisotropie der bindenden Kräfte herleiten.

Dem Wunsche, auf diese Art ein neues Hilfsmittel zur Erkennung des Aufbaues der Krystalle zu schaffen, gesellte sich die Hoffnung, auch ein für die *allgemeine physikalische Dispersionstheorie* interessantes Thema zu erhalten. Denn im Gegensatz zu der von anfang an mit Mittelwerten rechnenden Dispersionstheorie isotroper Körper, hat man es hier mit einer *streng definierten Aufgabe* zu tun, welche jede Mittelwertsbildung zur Berechnung des Feldes unnötig macht. Das beobachtbare optische Feld freilich enthält nicht alle Zacken und Schroffen des in den Formeln genau beschriebenen Feldes, aber wir sehen aufs deutlichste die eigentliche Entstehung jenes abgerundeten langsam veränderlichen Mittelwertes, der uns die ebene Welle bedeutet. Eine Folge der großen Bestimmtheit der Aufgabe war es, daß manche Punkte genauer berücksichtigt werden mußten, als es in anderen Dispersionstheorien geschieht (§ 3).

§ 2. Die allgemeinen Beziehungen für das Feld in einem Elektronengitter.

Machen wir uns zunächst mit dem allgemeinen Gang der Rechnung vertraut, in so weit er unabhängig ist von der besonderen Art des gewählten Raumgitters.

Die *Fragestellung der Dispersionstheorie* lautet: mit welcher Geschwindigkeit und Dämpfung pflanzt sich eine ebene Welle von vorgegebener Frequenz in einem Medium fort, das durch Anzahl und Art (eventuell Lage) der schwingungsfähigen Elektronen charakterisiert ist? Die fraglichen Größen sind zusammengefaßt in der komplexen Größe k, welche in der Beschreibung der Welle durch die Formel

$$\mathfrak{E} = \mathfrak{Re}\,(E \cdot e^{-int + iks})$$

auftritt. Von der Klammer auf der rechten Seite hat nur der reelle Teil $\mathfrak{Re}$ physikalische Bedeutung; s ist der Weg in der Richtung der Wellennormale, n die Frequenz, und der reelle Teil k_1 von k gibt die Phasengeschwindigkeit $v = n/k_1$, während der imaginäre Teil k_2 die Dämpfung bewirkt.

Das aus Elektronen gebildete Gitter läßt sich für die Rechnung ersetzen durch ein aus *Dipolen* aufgebautes. Wird nämlich ein Elektron (Ladung $-e$) beim Schwingen aus seiner Lage gebracht, so dürfen wir in seiner ursprünglichen Gleichgewichtsstellung die Ladungen $+e$ und $-e$, welche einander kompensieren, hinzugefügt denken. Das $+e$ bildet mit dem verschobenen $-e$ zusammen den Dipol, während das Feld des in der Gleichgewichtslage befindlichen $-e$ statisch ist und für zeitlich periodische Vorgänge nicht in Betracht kommt.

Soll in diesem Gitter eine ebene Welle entstehen, deren Wellennormale s ist, so werden voraussichtlich alle Dipole in der gleichen Ebene $\perp s$ in gleicher Phase schwingen müssen. *Deshalb wird der Ansatz gemacht, daß Ebenen gleicher Dipolphase existieren. Die Phasengeschwindigkeit der Dipolanregung bleibt zunächst unbestimmt. Nun wird das Gesamtfeld, das durch Übereinanderlagern der von den Dipolen ausgehenden Einzelfelder entsteht, berechnet; dabei ergibt sich, wenn man von Einzelheiten absieht, tatsächlich eine ebene Welle, deren Phasengeschwindigkeit und Dämpfung ebenso groß ist, wie die entsprechenden Werte für die Dipolanregung. Schließlich werden auch diese Größen durch die Forderung bestimmt, daß jede Dipolschwingung von dem Teil des Feldes angeregt und unterhalten wird, welcher von sämtlichen übrigen Dipolen des Gitters dem betreffenden zugestrahlt wird (dynamische Gleichgewichtsbedingung).*

Seien XYZ die Koordinaten eines Dipols, während xyz die laufenden Koordinaten des Aufpunktes bezeichen; sei ferner

$$S = X\cos(s,x) + Y\cos(s,y) + Z\cos(s,z)$$

der Abstand eines Dipols von der durch den Koordinatenanfangs-

punkt gehenden Ebene gleicher Dipolphase; v die (unbestimmte) Geschwindigkeit der Dipolphase, n die Frequenz, welche in dem Faktor e^{-int} den zeitlich periodischen Verlauf regelt, sodaß

$$c^{-in/v \,.\, S}$$

der Phasenfaktor der sich in der Richtung $-S$ fortpflanzenden Dipolanregung ist.

Die *Einzelerregung*, die ein Dipol von der Stärke e aussendet, ist dann durch den *Hertzschen Vektor*

$$1) \qquad \mathfrak{P} \,.\, e^{-int} = e\mathfrak{a} \cdot \frac{1}{R} \cdot e^{-in\left(t - \frac{R}{c} + \frac{S}{v}\right)}$$

charakterisiert, in welchem $R = ((X-x)^2+(Y-y)^2+(Z-z)^2)^{\frac{1}{2}}$ den Abstand Dipol-Aufpunkt bedeutet. Der Term $\frac{R}{c}$ im Exponenten besagt, daß das Feld des Dipols sich mit der gleichen Geschwindigkeit c wie im reinen Äther zum Aufpunkt hin fortpflanzen soll.

Indem wir den allen Dipolen gemeinsamen Faktor e^{-int} fortlassen und

$$2) \qquad \frac{n}{c} = k_0, \quad \frac{n}{v} = k$$

einführen, schreiben wir den für uns wichtigen Teil des Hertzschen Vektors:

$$3) \qquad \mathfrak{P} = e\mathfrak{a} \cdot \frac{1}{R} \cdot e^{ik_0 R - ikS},$$

und erinnern uns daran, daß die elektrische Feldstärke $\mathfrak{E}$ und die magnetische $\mathfrak{H}$ gewonnen werden durch die Operationen

$$4) \qquad \begin{aligned} \mathfrak{E} &= \text{rotrot } \mathfrak{P}; & \mathfrak{H} &= \frac{1}{c} \text{rot } \dot{\mathfrak{P}} \\ &= \text{grad div } \mathfrak{P} - \Delta\mathfrak{P}. \end{aligned}$$

Statt $\Delta\mathfrak{P}$ kann vermöge der außerhalb der Elektronen geltenden Ausbreitungsgleichung

$$5) \qquad \Delta\mathfrak{P} + k_0^2\mathfrak{P} = 0$$

auch $-k_0^2\mathfrak{P}$ eingesetzt werden.

Das Gesamtfeld ist dann gegeben durch das Potential

$$6) \qquad \Sigma\mathfrak{P} = e\mathfrak{a}\Sigma\frac{e^{ik_0 R - ikS}}{R} = e\mathfrak{a}\Pi,$$

die Summe erstreckt über alle Dipole des Gitters. Das Gesamtpotential wird bei jedem Dipol unendlich wie $\frac{1}{R}$ und ist also, da in festen Körpern auf die Wellenlänge des Lichtes viele hundert Moleküle entfallen, ein räumlich äußerst schnell wechselndes Feld, aus welchem *das beobachtbare optische Feld* nur die großzügige Dünung darstellt, die durch Mittelung gewonnen wird. Die optische, gemittelte Welle hat, wie zu erwarten, gleiche Geschwindigkeit und Dämpfung wie die Dipolphase.

Das optische Feld ist nicht etwa maßgebend für die Schwingungen der einzelnen Dipole. Diese werden vielmehr durch das „*erregende Feld*“ veranlaßt, das wir

7) $$e\mathfrak{a}\Pi' = \Sigma' \mathfrak{P}$$

schreiben, wobei der Akzent bedeutet, daß über alle Dipole mit Ausnahme des gerade betrachteten, zu erregenden Dipols summiert werden soll. Das erregende Feld ist somit gleich dem Gesamtfeld vermindert um den Anteil, der vom „Aufdipol“ herrührt. Für die *Schwingung* gilt dann (nach (4)) die Gleichung

8) $$\begin{aligned} m\ddot{\mathfrak{p}} + g\dot{\mathfrak{p}} + f\mathfrak{p} &= e\mathfrak{E}' \\ &= e^2 \operatorname{rotrot}(\mathfrak{a}\Pi' . e^{-int}). \end{aligned}$$

Hierbei ist

$$\mathfrak{p} = \mathfrak{a} . e^{-int}$$

die Elongation, m Masse, e Ladung, f quasielastische Kraft, g Reibungskoeffizient; führt man die Eigenfrequenz

$$n_0^2 = \frac{f}{m}$$

ein, so verlangt also diese Gleichung:

$$\mathfrak{a}\left(-n^2 + n_0^2 - in\frac{g}{m}\right) = \frac{e^2}{m} \operatorname{rotrot} \mathfrak{a}\Pi'.$$

Setzen wir zur Abkürzung

9) $$\frac{m}{e^2}\left(n_0^2 - n^2 - in\frac{g}{m}\right) = \Omega$$

und führen statt rotrot das aequivalente (grad div $- \Delta$) ein, so muß sein

10) $$\mathfrak{a}(\Omega + \Delta\Pi') = \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathfrak{a}\Pi'$$

oder in Komponenten:

$$10\,a)\quad \begin{cases} a_x(\Omega + \Delta\Pi' - \Pi'_{xx}) - a_y\Pi'_{xy} - a_z\Pi'_{xz} = 0 \\ -a_x\Pi'_{xy} + a_y(\Omega + \Delta\Pi' - \Pi'_{yy}) - a_z\Pi'_{yz} = 0 \\ -a_x\Pi'_{xz} - a_y\Pi'_{yz} + a_z(\Omega + \Delta\Pi' - \Pi'_{zz}) = 0. \end{cases}$$

Die Bedingung, daß diese 3 homogenen Gleichungen gleichzeitig erfüllt werden, ist:

$$11)\quad \begin{vmatrix} \Omega + \Delta\Pi' - \Pi'_{xx} & -\Pi'_{xy} & -\Pi'_{xz} \\ -\Pi'_{xy} & \Omega + \Delta\Pi' - \Pi'_{yy} & -\Pi'_{yz} \\ -\Pi'_{xz} & -\Pi'_{yz} & \Omega + \Delta\Pi' - \Pi'_{zz} \end{vmatrix} = 0.$$

Die $\Pi'_{..}$ hängen ab von der Konstanten k der Dipolphase, welche identisch ist mit der für die Ausbreitung des optischen Feldes maßgebenden Größe. *Daher stellt die Determinante (11) die Verbindung her zwischen dem Brechungsindex*

$$12)\quad \nu = \frac{c}{v} = \frac{k}{k_0}$$

und der Größe Ω, welche Elektronenkonstanten und Frequenz der optischen Welle enthält.

Zur Summation der Einzelpotentiale eines rhombischen Raumgitters legen wir naturgemäß die xyz-Axen in die Richtung der a, b, c-Axen des Gitters, welche beim Kristall die Richtungen der Hauptaxen des Indexellipsoids wären.

Die *Hauptbrechungsindizes* erhalten wir, indem wir die Dipolschwingung ganz in die Richtung einer der 3 Axen legen; da dies für jede Axe mit 2 ausgezeichneten Fortpflanzungsrichtungen der optischen Welle möglich ist, erhalten wir *zunächst 6 Hauptbrechungsindizes*, die von der Richtung der Wellennormale s und vom Polarisationszustand abhängen:

Schwingung $\mathfrak{a} = a_x$,	Ausbreitung längs z : k_{xz}, ν_{xz}
. . .	y : k_{xy}, ν_{xy}
$\mathfrak{a} = a_y$	x : k_{yx}, ν_{yx}
. . .	z : k_{yz}, ν_{yz}
$\mathfrak{a} = a_z$	x : k_{zx}, ν_{zx}
. . .	y : k_{zy}, ν_{zy}.

Hierin liegt eine Abweichung des Gitters von den wirklichen Kristallen, welche nur 3 Hauptbrechungsindizes haben, und wir wollen uns die Entstehung der 6 Indizes noch direkter klar machen.

Sei $\mathfrak{a} = a_x$ die Dipolamplitude; dann gibt es zwei ausgezeichnete Fälle, über die Ebenen konstanter Dipolphase zu bestimmen:

1) Phasenebene ist die xy-Ebene (Ausbreitung längs z)
2) Phasenebene ist die xz-Ebene (Ausbreitung längs y).

Wegen der Verschiedenheit der y- und z-Richtung beim rhombischen Gitter ergeben diese beiden Fälle 2 verschiedene erregende Felder und es sind im ganzen wirklich 6 Hauptbrechungsindizes vorhanden.

Man kann aber ohne Rechnung einsehen, daß der Unterschied $\nu_{xz} - \nu_{xy}$ klein sein muß gegen die eigentliche Doppelbrechung, z. B. $\nu_{xz} - \nu_{yz}$, d. h. gegen den Fall, wo bei gleicher Phasenebene xy bald die Schwingung $\mathfrak{a} = \mathfrak{a}_x$, bald $\mathfrak{a} = \mathfrak{a}_y$ betrachtet wird. Die Entstehung dieser eigentlichen Doppelbrechung wird am deutlichsten, wenn man Fig. 1 betrachtet, welche die Phasenebene

Fig. 1.

$Z = 0$ in der Nachbarschaft des durch einen Kreis ausgezeichneten Aufdipols darstellt. Die x-Axe möge mit der Richtung größten Gitterabstandes zusammenfallen; dann stellt die linke Hälfte von Fig. 1 den Fall $\mathfrak{a} = \mathfrak{a}_x$, die rechte $\mathfrak{a} = \mathfrak{a}_y$ dar. Nun strahlt ein Dipol in der Axenrichtung viel schwächer als in der Äquatorebene; deshalb stammt in der linken Hälfte der Figur 1 der Hauptteil der Erregung des Aufdipols von der Kolonne, in der rechten Hälfte aber von jener Zeile, welche den Aufdipol enthält. Denken wir uns die nächste Gitterschicht $Z = 2c$ hinzu, so wirkt wieder links die Kolonne, welche über dem Aufdipol liegt, mehr als die entsprechende Zeile; rechts ist es umgekehrt. Die Verschiedenheit des erregenden Feldes ist durch die Ungleichheit der Abstände a und b bedingt und liegt also an der verschiedenen Orientierung der Dipolaxen gegen die Gitteraxen. — Bisher ist unberücksichtigt geblieben, daß wegen der Ausbreitung der Welle die Dipolschicht $Z = 2c$ eine kleine Phasenverschiebung gegen die Schicht $Z = 0$ hat. Dieser Umstand hat sehr geringen Einfluß, weil $2(a, b, c) \ll \lambda$. Doch ermöglicht er es, die gleiche Lage der Dipolaxen gegen die Gitteraxen auf 2 ausgezeichnete Arten hervorzubringen, z. B. in Fig. 1 links mit der Phasenverschiedenheit längs der z-Richtung, wie bisher angenommen (ν_{xz}), oder längs der y-Richtung (ν_{xy}). Da der Einfluß der Phase an sich klein ist, so ist der Unterschied dieser beiden Fälle völlig zu vernachlässigen gegen den Unterschied solcher Fälle, bei denen die

Orientierung der Dipole verschieden ist. So erhält das Gitter wie jeder Kristall nur 3 merklich verschiedene Hauptbrechungsindizes.

Bei der Berechnung der Hauptbrechungsindizes (Ausbreitung längs einer, Schwingung in einer anderen Axe) behält das Gitter die 3 Koordinatenebenen als Symmetrieebenen und deshalb ist an den Gitterpunkten $\Pi'_{xy} = \Pi'_{xz} = \Pi'_{yz} = 0$; die Determinante reduziert sich auf die Diagonalglieder und man hat *zur Bestimmung von* ν_{xx} *die Gleichung* nach 10a)

13) $$\Omega + (\Delta\Pi' - \Pi'_{xx})_z = 0.$$

Der Index z soll daran erinnern, daß die für Ausbreitung längs z spezialisierten Formeln genommen werden müssen, um ν_{xx} zu finden. In dieser Gleichung enthalten die zweiten Ableitungen des Potentiales — wie die Annäherungen zeigen — nur das Verhältnis $\frac{k}{k_0} = \nu$, das die Frequenz n nicht enthält; diese kommt nur in der Elektronenkonstanten Ω vor.

Eliminiert man also aus 13) und der analogen Gleichung für ν_{yz}

$$\Omega + (\Delta\Pi' - \Pi'_{yy})_z = 0$$

die Elektronenkonstante Ω, *so erhält man eine implizite Beziehung zwischen den zwei Hauptbrechungsindizes* ν_{xz} *und* ν_{yz}, *welche unabhängig ist von der Frequenz n, ferner von der Anzahl und Art der schwingenden Dipole und die allein abhängt von der Struktur:*

14) $$(\Delta\Pi' - \Pi'_{xx})_z = (\Delta\Pi' - \Pi'_{yy})_z.$$

Wie sich weiterhin ergeben wird, liefert diese Gleichung im Fall des rhombischen Gitters die bereits von T. H. Havelock (vgl. § 4) aufgestellte Beziehung

$$\frac{1}{\nu_x^2 - 1} - \frac{1}{\nu_y^2 - 1} = \text{Konst.} = \mathbf{D}_{xy},$$

deren Unabhängigkeit von der Wellenlänge Havelock bei einigen Kristallen bestätigt fand. *Die Berechnung von* Π'_{xx} *und* Π'_{yy} *wird uns in die Lage setzen, die Größe dieses Maßes* **D** *der strukturellen Doppelbrechung aus gegebenen Axenverhältnissen abzuleiten.*

§ 3. Prinzipielles über Ansatz und Rechnung.

I. Aus dem Gang der Untersuchung, der im vorigen § auseinandergesetzt wurde, ist ersichtlich, daß *die „einfallende ebene Welle"* $\mathfrak{E}_0$, welche sonst in der Dispersionstheorie eine Rolle spielt,

hier fortfällt. Die Anregung der Dipole geschieht nicht durch ein Feld $\mathfrak{E}_0 + \Sigma$ rotrot $\mathfrak{P}$, sondern allein durch den letzten Teil, den sich die Dipole gegenseitig zustrahlen. Es wird also eigentlich nur derjenige Schwingungsvorgang des Gitters herausgesucht, der „*dynamisch abgeschlossen*“ ist, d. h. ohne äußere Anregung $\mathfrak{E}_0$ bestehen kann. Das letztere ist cum grano salis zu verstehen, da bei der Schwingung fortwährend Energie weiterströmt. Die genaue Bedeutung geht aus der folgenden Betrachtung hervor, welche die Idealisierung des Ansatzes klar macht.

Ein ganz bestimmtes Dispersionsproblem ist folgendes: Auf ein endlich dickes Stück eines Gitters fällt eine ebene Welle $\mathfrak{E}_0$ auf; die Dipole geraten in Mitschwingen und das Gesamtfeld ist zu bestimmen. — Wir sind nach allen bisherigen Erfahrungen überzeugt davon, daß die Superposition der Einzelfelder, d. h. der ebenen Welle $\mathfrak{E}_0$ und aller Kugelwellen das Feld liefert, wie es beobachtet wird: reflektierte, gebrochene, durchgelassene und eventuell mehrfach im Innern reflektierte Wellen, welche abgesehen von den kleinsten Einzelheiten eben sind.

Für die mathematische Behandlung eignet sich dies Problem deshalb nicht, weil die Schwingungen der Dipole unbekannt sind. Zumal in den Randschichten kann das Gesetz der Dipolschwingungen recht kompliziert sein, während im Innern des Krystalles die Unabhängigkeit der Lichtfortpflanzung von der Dicke des Körpers auf eine gewisse Regelmäßigkeit schließen läßt: die Schwingungen unterscheiden sich nur durch einen Phasenfaktor, der die gleichen Phasenebenen für die Dipolschwingungen hervorbringt, wie sie an der gebrochenen Welle gefunden werden. Den Beweis der Richtigkeit dieser Vorstellung sieht man in § 6: im unendlich dicken Gitter bringen Dipolschwingungen mit derartigen Phasenebenen *allein* eine ebene Welle $\mathfrak{E}$ mit gleichen Phasenebenen zustande.

Dies Ergebnis zeigt uns, daß die ebene einfallende Welle $\mathfrak{E}_0$ im Innern der Körper nicht mehr existiert: $\mathfrak{E}_0$ würde mit $\mathfrak{E}$ zusammen ja keine einfache ebene Welle bilden können. Der Grund, weshalb im unendlichen Gitter $\mathfrak{E}_0$ fortgelassen werden muß, liegt darin, daß gegenüber der dispergierenden Platte die *Randschichten* verschwunden sind. Aufgabe der oberen Randschicht ist es, durch die Art der Dipolschwingungen 1.) die nach oben reflektierte Welle hervorzubringen, 2.) eine ebene Welle von gleicher Richtung und umgekehrter Phase wie $\mathfrak{E}_0$ zu erzeugen, sodaß diese ganz auf-

gehoben wird[1]), 3.) die ‚dynamisch abgeschlossene' Schwingung anzuregen. Ähnliche Aufgaben hat die untere Randschicht. Wäre dies nicht so, so würde im Innern keine Gleichförmigkeit der Schwingungen herrschen dürfen, da diese allein eine ebene optische Welle erzeugt.

Zur Vereinfachung des Problems kann die Randwirkung mit der einfallenden Welle für das Innere der Schicht zum Feld 0 zusammengefaßt werden, und man behält das Feld übrig, das von gleichartigen Dipolschwingungen herrührt. Dies gleichartig schwingende System denkt man sich bis ins Unendliche fortgesetzt und gelangt so zu unserm Ansatz.

Zusammenfassend können wir also sagen: im unendlichen Gitter hat sich die einfallende Welle gegen die Wirkung der Randschicht fortgehoben.

II. Eine zweite Frage, welche der Erörterung bedarf, hängt mit der *Konvergenz* zusammen. Das Gesamtpotential

$$a\Pi = a\Sigma \frac{e^{i(kR_0 - kS)}}{R}$$

konvergiert — rein formal — nur dann absolut, wenn $k_{02} > k_2$, d. h. wenn für alle Richtungen die Absorption der einzelnen Kugelwellen $R^{-1} e^{ik_0 R}$ größer ist, als das Anwachsen der Dipolamplitude infolge des Faktors e^{-ikS} (in der Richtung entgegen dem Strahl). Für $k_{02} < k_2$ findet formal Divergenz statt, was begreiflich ist, da entgegen der Strahlrichtung die einzelnen Summanden exponentiell zunehmen. Und doch müssen wir auch im absorbierenden Kristall das Feld dadurch berechnen können, daß die einzelnen Kugelwellen superponiert werden, als ob sich jede wie im leeren Äther fortpflanzte, d. h. wir haben physikalisch Ursache, die Summe mit $k_2 > 0$, $k_{02} = 0$ zu bilden[2]).

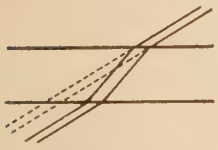

Fig. 2.

1) Als Beispiel für die Wirkung der Randschicht vergl. den schrägen Einfall eines begrenzten ebenen Lichtbündels: auch dort wird die einfallende Welle durch Interferenz mit den Kugelwellen vom Rande aufgehoben.

2) Der Einwand liegt nahe, daß ein unendlich großer absorbierender Körper, der in unendlicher Entfernung von der Oberfläche noch Lichtintensität enthalte, physikalisch nicht möglich sei. Es muß aber darauf aufmerksam gemacht werden, daß auch beim endlichen absorbierenden Körper eine der Divergenz der unendlichen Summe ähnliche begriffliche Schwierigkeit auftritt, indem scheinbar die vom Aufdipol am weitesten fortliegenden Dipole (entgegen dem Strahl) am meisten

Die scheinbare Divergenz der Summe wird verständlich, wenn wir etwa an folgendes Beispiel denken: Eine Reihe von Dipolen, welche wir zwangläufig führen und die wir Sender nennen wollen, sei so angeordnet, daß ihre retardierten Potentiale im Aufpunkt alle mit gleicher Phase ankommen. Wird die Reihe der Sender unendlich, so divergiert das Feld im Aufpunkt wie $\Sigma \frac{1}{R}$, was physikalisch selbstverständlich ist.

Nun umkleiden wir diese Senderreihe mit einem Gitter von Dipolen, deren Schwingungen mit Reibungsverlusten verbunden seien; sie sollen ausschließlich durch die Senderschwingungen erregt werden (wobei natürlich die Wechselwirkungen zwischen den Dipolen mit in Betracht zu ziehen sind). Wir wissen erfahrungsmäßig, daß die bloße Superposition der Kugelwellen eines solchen Gitters eine Schwächung der Senderfelder — und zwar exponentiell mit der Entfernung — hervorbringt. Fassen wir daher jedes Senderfeld mit allen von ihm induzierten Resonanzen zu einem „Feld im ganzen“ zusammen, so ist das Gesamtfeld als Summe von exponentiell abnehmenden Gliedern konvergent. Als Summe der einzelnen Kugelwellen hingegen, die von Sendern und Resonatoren ausgehen, ist das Gesamtfeld nicht unbedingt konvergent, da z. B. die Summe aller Sender-Einzelfelder divergiert. Bei der bedingt konvergenten Summe von Einzelfeldern muß erst *der physikalisch wichtige Wert* festgelegt werden. Wir sagen: *Man soll jede Erregung mit allen von ihr induzierten Erregungen zusammenfassen zu einer ‚Erregung im ganzen‘ und diese summieren.* Hierfür muß nach dem obigen zunächst jede Dipolschwingung in so viele Teilschwingungen zerlegt werden, wie Sender vorhanden sind. Jeder Sender zusammen mit seinen Teilschwingungen gibt das exponentiell abnehmende „Feld im ganzen“. Auch jede Teilschwingung erzeugt ja Resonanzen (die oben unter „Wechselwirkungen“ zusammengefaßt wurden) und kommt „im ganzen“ exponentiell geschwächt an. Man wird deshalb den physikalischen Summenwert *auch als Grenzwert erhalten, indem man zunächst eine absolut konvergente Reihe von Erregungen, die mit Absorption* (k_{02}) *fortgeleitet werden, summiert und nun, falls die Summe eine stetige Funktion von* k_0 *ist, zum Grenzwert* k_0 = *reell übergeht.*

Ganz ähnlich wie bei der Senderreihe liegt der Fall bei unserm Gitter. Zunächst haben wir ja das Gesamtpotential *bei beliebiger*

---

zum erregenden Feld beitragen. Die folgenden Überlegungen stellen klar, was unter „Beitrag“ eigentlich zu verstehen ist („Feld im Ganzen“).

Art der Dipolschwingung zu bilden, was auf dasselbe herauskommt, als ob jeder Dipol ein geführter Sender wäre. Hierbei ist im allgemeinen die Konvergenz der Summe nicht zu erwarten, da ja die Dipole nicht frei in Wechselwirkung treten können. Erst wenn wir die Dipolschwingung durch das zugestrahlte Feld bestimmen, kann jede Dipolschwingung vollständig als Resonanz auf die anderen Schwingungen aufgefaßt werden. Würden wir in dem so schwingenden System in physikalisch richtiger Weise ein beliebiges Einzelpotential mit allen von ihm induzierten Potentialen zusammenfassen, so würde jedes solche ‚Feld im Ganzen' exponentiell geschwächt ankommen. Der Wert, der durch solche physikalische Summation entstände, ist deshalb identisch mit dem Grenzwert, der aus der Summation der Kugelwellen entsteht, wenn jede zunächst hinreichend stark auf ihrem Wege absorbiert gedacht wird.

Zur Summation muß deshalb $k_{02} > k_2 \geqq 0$ *vorausgesetzt werden. In dem Resultat aber gehen wir stillschweigend zu dem Wert* $k_0 = \frac{n}{c}$ *über.*

§ 4. Verhältnis zu anderen Theorien.

Am nächsten steht diese Arbeit der Lorentz[1])-Planck[2])-schen Theorie der Dispersion in isotropen Medien, zu deren Resultaten sie führt, wenn das Gitter cubisch angenommen wird. In der Behandlungsweise ergibt sich ein Unterschied, weil der isotrope Körper die Aufstellung von Mittelwerten erfordert, das in allen Stücken bestimmte Gitter dagegen sich ohne solche berechnen läßt. Neben diesem mehr technischen Unterschied, besteht der Hauptunterschied im Ansatz in dem Verzicht auf die einfallende Welle $\mathfrak{E}_0$. Bei Planck ist nie ausdrücklich von einem unendlich ausgedehnten Körper die Rede und infolgedessen muß bei ihm die einfallende Welle ebenso beibehalten werden, wie die Randschicht mit ihren unbekannten Dipolschwingungen. Es wird aber von Planck nicht etwa das im vorigen § aufgestellte Dispersionsproblem der endlichen Platte gelöst, indem gezeigt wird, wie die ebene Welle anderer Richtung und Wellenlänge durch den Anstoß der einfallenden entsteht. Hierbei müßte $\mathfrak{E}_0$ als ebene Welle angesetzt werden, während in Wirklichkeit ein gewisses $\mathfrak{E}$ als ebene Welle angesetzt wird, welches wir mit dem Mittelwert unseres Gesamtfeldes vergleichen möchten, da es das optisch wahrnehmbare Feld sein soll. Der Wert von $\mathfrak{E}_0$ läßt sich aus dem angesetzten $\mathfrak{E}$ nur dann be-

1) H. A. Lorentz, The Theory of Electrons, Cap. IV.
2) M. Planck, Berl. Ber. XXIV, 1902, pg. 470.

stimmen, wenn sämtliche Dipolschwingungen bekannt sind. Im endlichen Körper ist dies nicht der Fall; im unendlichen Körper hat nach unseren Erfahrungen (§ 6) $\mathfrak{E}_0$ keinen Platz.

Auch bei Planck wird also nur ein dynamisch möglicher Schwingungszustand aufgesucht und nicht etwa gezeigt, daß dieser von einer einfallenden ebenen Welle angeregt wird.

Die gleichen Schwierigkeiten, welche bei uns die Konvergenz der Summen bereiten, treten an Plancks Integral $\mathfrak{A}$ auf. Es ist im unendlichen Körper ebenso unbestimmt, wie unsere Summen vor der Festsetzung der Summationsordnung. Im *endlichen* absorbierenden Körper bleibt die in der Anmerkung auf Seite 11 hervorgehobene Schwierigkeit bestehen, daß entgegen der Strahlrichtung jeder Dipol um so mehr zum Felde beiträgt, je weiter entfernt er ist (die Amplituden der Dipole nehmen exponentiell zu). Diese Konsequenz, die zunächst unsern physikalischen Anschauungen widerspricht, hängt mit der Definition der richtigen Summation zusammen und ist nach dem vorigen § dahin aufzuklären, daß von einer Dipolschwingung im Körperverband nicht das retardierte Potential physikalisch von Bedeutung ist, sondern das „Feld im Ganzen": dies nimmt in allen Richtungen ab, je weiter die Quelle fort ist.

Wie in Planck's Theorie wird auch bei uns zunächst nur *eine* Jonengattung angenommen. Die Formel mit 4 Konstanten, welche bei Anwesenheit von 2 Gittern aus verschiedenen Jonen entsteht, hat im allgemeinen keine so einfache Bauart, wie etwa die Drudesche Formel[1]). Da zudem zur Anwendung die gegenseitige Lage der beiden Gitter bekannt sein muß, wurde kein Versuch gemacht, die Formel zu prüfen.

Mit dem Problem der *Doppelbrechung* hängt eine Gruppe von Arbeiten von Lord Rayleigh[2]), T. Havelock[3]), N. Kasterin[4]) zusammen. Ihre Grundlage bildet Rayleighs Arbeit über die Eigenschaften eines Mediums, in dem „Hindernisse" gitterartig verteilt sind. In ihr wird die Potentialgleichung $\Delta u = 0$ integriert mit gewissen Grenzbedingungen an den Kugeloberflächen der Hindernisse und im Unendlichen. Die Betrachtung wird in einer ersten Arbeit von Havelock übernommen. Eine Dispersionsformel wird

---

1) Drude, Lehrbuch der Optik, II. Aufl. 1906, pg. 367.

2) Lord Rayleigh, Phil. Mag. XXXIV, 1892.

3) T. H. Havelock, Proc. Roy. Soc. London LXXVII, 1906, p. 170.

4) N. Kasterin, Lorentz-Jubelband, oder Versl. Acad. Wetensch. Amsterdam 1897/98 p. 460.

dadurch gewonnen, daß die gefundene Dielektrizitätskonstante als nach der Cauchyschen Formel abhängig von der Wellenlänge *angesetzt* wird.

Kasterin hingegen gelingt es mit ähnlichen Methoden, wie sie Rayleigh brauchte, für die Ausbreitungsgleichung $\Delta u + k^2 u = 0$ die Lösung zu finden, welche die Grenzbedingungen an den Kugeloberflächen erfüllt und ebene Wellen darstellt. Es ist schade, daß diese hervorragende Arbeit nur auf akustische Probleme angewandt wurde; die berechneten Kurven für den Brechungs- und Absorptionsindex des Kugelgitters sind von großer Schönheit und Übereinstimmung mit den für die optischen Indices gültigen Kurven.

Den Übergang von Kasterins Arbeit zu der vorliegenden bildet die Bemerkung[1]), daß die Beeinflussung einer ebenen Welle durch ein kleines kugelförmiges Hindernis in erster Näherung ersetzt werden kann durch eine von dem Hindernis ausgehende Dipolkugelwelle.

Eine zweite Arbeit von Havelock[2]) behandelt die Doppelbrechung im Anschluß an Planck: so wie es in isotropen Körpern um jeden Aufdipol eine kugelförmige Höhlung gibt, derart daß die in ihr gelegenen Moleküle den Aufdipol im Mittel nicht erregen, so wird es nach Havelocks Auffassung im Kristall eine anders geformte Höhlung der gleichen Eigenschaft geben, welche in erster Näherung ein Ellipsoid ist. Die Doppelbrechung kann durch dessen Exzentrizität ausgedrückt werden, wird aber nicht in Verbindung mit meßbaren Größen gebracht. Havelock findet in dieser Arbeit die Beziehung D_{xy} (§ 2) zwischen den Hauptbrechungsindices, welche von der Wellenlänge unabhängig sein soll.

Zu der gleichen Beziehung gelangt Langevin[3]) auf Grund der Annahme, daß jedes Molekül anisotrop sei, d. h. wenn es isoliert im Raum gedacht wird, 3 verschiedene Eigenfrequenzen besitze. Wir zeigen in § 9, daß die qualitativen Resultate der Annahme anisotroper Moleküle die gleichen sein müssen, wie bei der Annahme einer Gitterstruktur.

Schließlich muß noch auf die Arbeiten von H. A. Lorentz[4]) sowie von Gans und Happel[5]) hingewiesen werden, welche für die Auffassung der Absorption in einem Kristall besonders wichtig

---

1) Vergl. P. Debye, Der Lichtdruck auf Kugeln, Diss., pg. 50.

2) T. Havelock, Proc. Roy. Soc. London LXXX, 1907, p. 28.

3) P. Langevin. Sur les birefringences électrique et magnétique. Le Radium VII, 1910.

4) H. A. Lorentz, Verslagen K. Acad. Amsterdam. XVIII, 2 1909, pg. 650.

5) R. Gans, H. Happel, Ann. d. Phys. 29, 1909.

sind. Sie behandeln die Zerstreuung des Lichtes durch die Moleküle und es wird gezeigt, daß in gitterartig aufgebauten Körpern keine Zerstreuung stattfindet.

§ 5. Mathematische Vorbereitungen.

Zur Ausführung der Summation der Einzelpotentiale

$$\frac{e^{i(k_0 R - kS)}}{R}$$

erweisen sich zwei Darstellungen von $R^{-1} \cdot e^{ikR}$ als besonders geeignet, da sie nicht die irrationale Größe $R = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}$, sondern die Koordinaten quadratisch oder linear enthalten. Wir nennen die eine Darstellung das einfache, die andere das dreifache Integral.

I. Das einfache Integral.

Die Größe k^2 liege in der komplexen Ebene unter dem Winkel 2φ gegen die reelle Axe.

Dann konvergiert

$$S(k^2) = \int e^{-\varepsilon^2 + \frac{k^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon, \tag{1}$$

wenn ε so geführt wird, daß für kleine ε $\Re e\left(\frac{k^2}{\varepsilon^2}\right) < 0$, für große ε $\Re e(\varepsilon^2) > 0$ ist. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn ε innerhalb des Sectors $-\frac{\pi}{4} + \varphi$ und $-\frac{\pi}{4}$ von 0 ins Unendliche läuft (vergl. Fig. 3).

Wir finden den Wert des Integrals, indem wir nach einem der Wurzelwerte $k = \pm\sqrt{k^2}$ differenzieren:

$$\frac{\partial S}{\partial k} = 2k \int e^{-\varepsilon^2 + \frac{k^2}{\varepsilon^2}} \cdot \varepsilon^{-2} \, d\varepsilon.$$

Die Substitution $\eta = -i\frac{k}{\varepsilon}$ führt den in dem bezeichneten Winkelraum gelegenen Weg in sich über, unter Umkehrung der Durchlaufungsrichtung; dabei wird das Integral

$$\frac{\partial S}{\partial k} = -2i \int e^{\frac{k^2}{\eta^2} - \eta^2} d\eta$$
$$= 2iS.$$

Die Integration hiervon liefert

$$S = \text{Konst. } e^{2ik}.$$

Zur Bestimmung der Integrationskonstante dient die Bemerkung, daß für $k = 0$ der Weg ganz auf der reellen Axe gewählt werden kann, und dann

$$\int_0^\infty e^{-\varepsilon^2} d\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

ist. Schließlich geht das Vorzeichen von $k = \pm\sqrt{k^2}$ im Exponenten von e daraus hervor, daß S, so wie der Integrand, verschwinden muß, wenn k^2 unter Wahrung des Winkels 2φ in's Unendliche rückt. Daher ist

$$\int e^{-\varepsilon^2 + \frac{k^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{+2ik}. \tag{2}$$

Setzen wir $\varepsilon = R \cdot \eta$, so wird

$$\int e^{-R^2\eta^2 + \frac{k^2}{R^2}\cdot\frac{1}{\eta^2}} d\eta = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\frac{e^{2ik}}{R}.$$

Schreiben wir schließlich $\frac{1}{2}kR$ für k, so erhalten wir *das einfache Integral*

$$\frac{e^{ikR}}{R} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} e^{-R^2\varepsilon^2 + \frac{k^2}{4\varepsilon^2}} d\varepsilon, \tag{3}$$

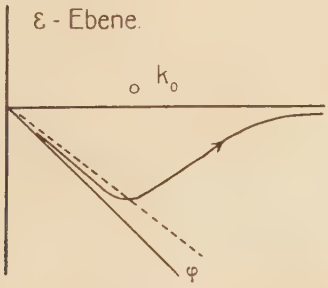

Fig. 3.

bei dem sich der Weg (Fig. 3) in einiger Entfernung vom Nullpunkt aus dem bezeichneten Winkelsector hinaus und auf die reelle Axe rücken läßt.

II. Das dreifache Integral.

Um aus der obigen Darstellung (3), welche die Koordinatenquadrate $R^2 = x^2 + y^2 + z^2$ enthält, eine Darstellung zu gewinnen, bei welcher der Exponent von e eine lineare Funktion von x, y, z ist, verfahren wir am einfachsten so:

Es ist

$$4) \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\lambda^2}{4\varepsilon^2} - i\lambda x}\, d\lambda = e^{-x^2\varepsilon^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(\frac{\lambda}{2\varepsilon} + ix\varepsilon\right)^2} d\lambda$$

$$= 2\varepsilon\, e^{-x^2\varepsilon^2} \cdot \sqrt{\pi}.$$

Ersetzen wir in (3) $e^{-x^2\varepsilon^2}$ durch das hieraus folgende Integral, und ebenso $e^{-y^2\varepsilon^2}$ und $e^{-z^2\varepsilon^2}$ durch analoge Integrale nach Variabeln μ und ν, so erhalten wir ein 4-faches Integral:

$$5) \qquad \frac{e^{ikR}}{R} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\right)^3 \int\int\int\int e^{-\frac{\lambda^2+\mu^2+\nu^2}{4\varepsilon^2} - i(\lambda x + \mu y + \nu z) + \frac{k^2}{4\varepsilon^2}} d\lambda\, d\mu\, d\nu\, \varepsilon$$

Die Integrationsfolge darf hierbei vertauscht werden und die Integration nach ε kann ausgeführt werden:

$$6) \qquad \int_{(0)}^{\infty} e^{-\frac{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2}{4\varepsilon^2}} \varepsilon^{-3}\, d\varepsilon = -\frac{2}{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2}.$$

Es bleibt das dreifache Integral

$$7) \qquad \frac{e^{ikR}}{R} = -\frac{1}{2\pi^2} \overbrace{\int\int\int}^{-\infty \ \ +\infty} e^{i\lambda x + i\mu y + i\nu z} \frac{d\lambda\, d\mu\, d\nu}{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2};$$

dies Integral hat die gewünschte für die Summation äußerst bequeme Form.

Es sei bemerkt, daß die Substitution von $-\lambda$ an Stelle von $+\lambda$ nichts ändert außer dem Vorzeichen der Exponenten. Ist ferner R der Abstand des Punktes xyz vom Punkte XYZ, so gilt das allgemeinere Integral

$$8) \qquad \frac{e^{ikR}}{R} = -\frac{1}{2\pi^2} \int\int\int e^{\pm i\lambda(X-x) \pm i\mu(Y-y) \pm i\nu(Z-z)} \frac{d\lambda\, d\mu\, d\nu}{k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2}$$

Schließlich sei bemerkt, daß die Integrationswege von der reellen Axe verschoben werden können, wobei aber nicht

$$k^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2 = 0$$

werden darf. Lassen wir λ und μ reell, so darf z. B. ν^2 nicht die vom Punkte k^2 ausgehende nach dem 2. Quadranten gezogene Parallele zur reellen Axe überschreiten, da diese die Gesamtheit der Punkte $k^2 - \lambda^2 - \mu^2$ darstellt. Über die Art, wie sich die Verschiebung der Wege übersehen läßt, vgl. Note I. Es genüge hier zu sagen, daß, bei nicht verschwindendem imaginären Teil von k, die drei Variabeln auf identischen Wegen in kleinem Abstand über der reellen Axe laufen können.

§ 6. Das Gesamtpotential und das optische Feld.

Um das Gesamtpotential des rhombischen Punktgitters zu bilden, haben wir, zunächst unter Benutzung des dreifachen Integrals (§ 5, (8)), die Einzelpotentiale

$$1) \quad \frac{e^{i(k_0 R - kS)}}{R} = -\frac{e^{-ikS}}{2\pi^2} \int\int\int \frac{e^{\pm i\lambda(X-x) \pm i\mu(Y-y) \pm i\nu(Z-z)}}{k_0^2 - \lambda^2 - \nu^2 - \mu^2} d\lambda\, d\mu\, d\nu$$

zu summieren.

Die Koordinaten der Gitterpunkte nennen wir

$$X = 2al, \quad X = 2bm, \quad Z = 2cn,$$

wo l, m, n alle ganzzahligen positiven und negativen Werte annehmen. (a, b, c) sind die halben Abstände von Nachbarpunkten und zugleich die Abstände benachbarter Symmetrieebenen des Systems. k_0 ist die Ausbreitungskonstante der einzelnen Kugelwellen, k die der Dipolphase. Wir setzen

$$2) \quad \begin{aligned} kS &= k(X\cos(S,x) + Y\cos(S,y) + Z\cos(S,z)) \\ &= \alpha X + \beta Y + \gamma Z; \end{aligned}$$

dabei ist

$$2a) \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = k^2.$$

Das Gesamtpotential ist nun

$$3) \quad \Pi = -\frac{1}{2\pi^2} \sum_{l,m,n}^{-\infty \cdots +\infty} \int\int\int e^{2ial(\pm\lambda - \alpha) + 2ibm(\pm\mu - \beta) + 2icn(\pm\nu - \gamma)} \cdot e^{\mp i\lambda x \mp i\mu y \mp i\nu z} \frac{d\lambda\, d\mu\, d\nu}{k_0^2 - \lambda^2 - \mu^2 - \nu^2}.$$

Führen wir die Summation am Integranden aus, so zerfällt die

dreifache Summe in das Produkt dreier einfacher geometrischer Reihen, von denen die erste heißt

$$\sum_{-\infty}^{+\infty} l \; e^{2ial(\pm\lambda-\alpha)\mp i\lambda x}$$

Die Konvergenz dieser Summe für positive und negative l kann dank der Unbestimmtheit des Vorzeichens von λ erreicht werden, sobald der imaginäre Teil k_{02} größer ist als k_2 (vgl. § 3). In diesem Falle ist es nämlich möglich, λ auf einer über α gelegenen Parallelen zur reellen Axe laufen zu lassen, ebenso μ über β, ν über γ (siehe Note 1), sodaß also $+\lambda-\alpha$ einen positiven imaginären Teil hat, was zur Konvergenz der Summe über positive l genügt. Die Summe über die negativen l konvergiert, wenn wir das Vorzeichen von λ umkehren.

Die Summation nach l ergibt demnach

$$\sum_{-\infty}^{+\infty} l \ldots = \sum_{0}^{-\infty} e^{2ial(\lambda-\alpha)-i\lambda x} + \sum_{-1}^{-\infty} e^{-2ial(\lambda+\alpha)+i\lambda x}$$

$$= \frac{e^{-i\lambda x}}{1-e^{2ia(\lambda-\alpha)}} + \frac{e^{+i\lambda x+2ia(\lambda+\alpha)}}{1-e^{2ia(\lambda+\alpha)}}$$

4)

$$= \frac{e^{-i\lambda x}(1-e^{2ia(\lambda+\alpha)})+e^{i\lambda x+2ia(\lambda+\alpha)}(1-e^{2ia(\lambda-\alpha)})}{1+e^{4ia\lambda}-2\cos 2a\alpha\, e^{2ia\lambda}}$$

$$= \frac{e^{-i\lambda(x+2a)}-e^{-i\lambda x+2ia\alpha}+e^{i\lambda x+2ia\alpha}-e^{i\lambda(x+2a)}}{2\cos 2a\lambda-2\cos 2a\alpha}$$

$$= -i\,\frac{\sin\lambda(x+2a)-e^{2ia\alpha}\sin\lambda x}{\cos 2a\lambda-\cos 2a\alpha}.$$

Entsprechend gestalten sich die Summationen nach m und n.

Das Gesamtpotential ist also

5)

$$\Pi = -\frac{i}{2\pi^2}\int\int\int \frac{\sin\lambda(x+2a)-e^{2ia\alpha}\sin\lambda x}{\cos 2a\lambda-\cos 2a\alpha}\cdot\frac{\sin\mu(y+2b)-e^{2ib\beta}\sin\mu y}{\cos 2b\mu-\cos 2b\beta}\cdot$$
$$\cdot\frac{\sin\nu(z+2c)-e^{2ic\gamma}\sin\nu z}{\cos 2\nu c-\cos 2c\gamma}\cdot\frac{d\lambda\,d\mu\,d\nu}{k_0^2-\lambda^2-\mu^2-\nu^2},$$

wobei als Integrationswege für $(\lambda\,\mu\,\nu)$ die Parallelen zur reellen Axe oberhalb von $(\alpha\,\beta\,\gamma)$ gelten (Weg 1, Fig. 4).

Aus den Integranden läßt sich ein Teil entfernen. Schreiben wir im λ-Integral

$$\frac{\sin\lambda(x+2a)-e^{2ia\alpha}\sin\lambda x}{\cos 2a\lambda-\cos 2a\alpha}=\frac{\sin\lambda x\cos 2a\lambda+\cos\lambda x\sin 2a\lambda-e^{2ia\alpha}\sin\lambda x}{\cos 2a\lambda-\cos 2a\alpha}$$

$$=\sin\lambda x+\frac{\cos\lambda x\sin 2a\lambda-i\sin\lambda x\sin 2a\alpha}{\cos 2a\lambda-\cos 2a\alpha},$$

so hat der erste Term $\sin\lambda x$ den Nenner, welcher Pole des Integranden bedingt, verloren. Wir können dann für diesen Teil des Integrals den Weg von λ auf die reelle Axe verschieben; da $\sin\lambda x$ eine ungerade, $k^2-\lambda^2-\mu^2-\nu^2$ eine gerade Funktion von λ ist, ist das Integral Null und es bleibt übrig, wenn das gleiche für die μ- und ν-Integration vorgenommen wird:

$$6)\quad \Pi=-\frac{i}{2\pi^2}\int\int\int\frac{\cos\lambda x\sin 2a\lambda-i\sin\lambda x\sin 2a\alpha}{\cos 2a\lambda-\cos 2a\alpha}\cdots\frac{d\lambda\,d\mu\,d\nu}{k_0^2-\lambda^2-\mu^2-\nu^2}.$$

Es ist bequem, *von diesem Integral auf eine Summe überzugehen, indem man die Residuen an den Polen des Integranden bildet.* Die Pole für die λ-Integration liegen bei

$$\cos 2a\lambda_0=\cos 2a\alpha,\quad \lambda_0=\frac{l\pi\pm a\alpha}{a},$$

wo l eine positive oder negative ganze Zahl. In der λ-Ebene liegen die Pole auf den beiden Parallelen zur reellen Axe, die durch die Punkte $\pm\alpha$ gehen. (Fig. 4).

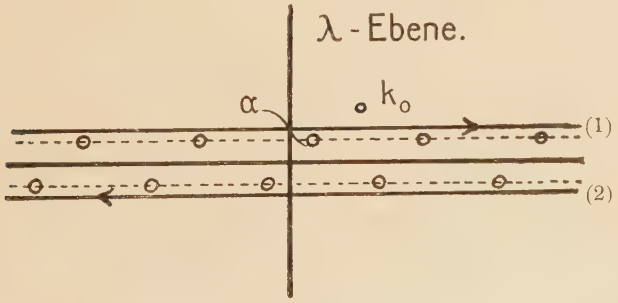

Fig. 4.

Beachten wir, daß der Integrand eine ungerade Funktion $u(\lambda)$ ist, so können wir bei der Substitution $\lambda'=-\lambda$ den bisherigen Weg (1) von λ ersetzen durch den symmetrisch zu (1) unterhalb der unteren Polreihe liegenden Weg (2), der in umgekehrter Richtung zu durchlaufen ist. Nehmen wir unter Hinzufügung des Faktors $^1/_2$ für jede Integration in allen 3 Variabeln-Ebenen den Weg (1) + (2), so entsteht

$$\Pi = -\frac{i}{16\pi^2}\underbrace{\int\int\int}_{(1)+(2)}\frac{\cos\lambda x\sin 2a\lambda - i\sin\lambda x\sin 2a\alpha}{\cos 2a\lambda - \cos 2a\alpha}\cdots\frac{d\lambda\, d\mu\, d\nu}{k_0^2-\lambda^2-\mu^2-\nu^2};$$

der durch das Unendlichferne geschlossene Weg (1)+(2) läßt sich zu Umläufen um die Pole zusammenziehen, wobei diese in negativem Sinne umkreist werden.

Das Residuum an einem der Pole $\lambda_0 = \frac{l\pi \pm a\alpha}{a}$ erhalten wir so:

$$\frac{\cos\lambda_0 x\sin 2a\lambda_0 - i\sin\lambda_0 x\sin 2a\alpha}{-2a\sin 2a\lambda_0(\lambda-\lambda_0)+\cdots}$$

$$= \frac{1}{\lambda-\lambda_0}\cdot\frac{-1}{2a}\left(\cos\lambda_0 x - i\sin 2a\alpha\cdot\frac{\sin\lambda_0 x}{\sin 2\lambda_0 a}\right)+\cdots$$

$$= \frac{1}{\lambda-\lambda_0}\cdot\frac{-1}{2a}\left(\cos\lambda_0 x - i\sin\lambda_0 x\cdot\frac{\sin 2a\alpha}{\pm\sin 2a\alpha}\right)+\cdots$$

$$= \frac{1}{\lambda-\lambda_0}\cdot\frac{-1}{2a}e^{\mp i\frac{l\pi\pm a\alpha}{a}\cdot x}+\cdots,$$

wobei die oberen Vorzeichen sich auf die Pole der oberen Reihe beziehen und umgekehrt. Die Summe aller Residuen, die von der Integration nach λ herrühren, ist

$$\frac{2\pi i}{2a}\left\{\sum_{-\infty}^{+\infty} l\,\frac{e^{-i\frac{l\pi+a\alpha}{a}x}}{k_0^2-\mu^2-\nu^2-\left(\frac{l\pi+a\alpha}{a}\right)^2}+\sum_{-\infty}^{+\infty} l\,\frac{e^{+i\frac{l\pi-a\alpha}{a}x}}{k_0^2-\mu^2-\nu^2-\left(\frac{l\pi-a\alpha}{a}\right)^2}\right\}$$

oder da die zweite Summe identisch ist mit der ersten (man setze $-l$ statt l für den Summationsbuchstaben):

$$\frac{2\pi i}{a}\sum_{-\infty}^{+\infty} l\,\frac{e^{-i\frac{l\pi+a\alpha}{a}x}}{k_0^2-\mu^2-\nu^2-\left(\frac{l\pi+a\alpha}{a}\right)^2}.$$

Bei analoger Ausführung der anderen Integrationen erhalten wir *das Gesamtpotential:*

$$7)\quad \Pi = -\frac{\pi}{2abc}\sum_{l,m,n}^{-\infty\cdots+\infty}\frac{e^{-i\frac{l\pi+a\alpha}{a}x-i\frac{m\pi+b\beta}{b}y-i\frac{n\pi+c\gamma}{c}z}}{k_0^2-\left(\frac{l\pi+a\alpha}{a}\right)^2-\left(\frac{m\pi+b\beta}{b}\right)^2-\left(\frac{n\pi+c\gamma}{c}\right)^2}.$$

Diese Reihe, welche äquivalent ist den Integralen (5) und (6), stellt das genaue elektromagnetische Feld dar, welches durch Superposition der Kugelwellen entsteht. Sie hat durchaus die Form einer Reihe

nach Eigenschwingungen, wie sie z. B. bei den erzwungenen Schwingungen einer Membran auftreten[1]). Wir können das allgemeine Glied der Reihe geradezu als die Eigenschwingung des Punktgitters bei gegebener Ausbreitungsart auffassen. Die Vorherbestimmung der Ausbreitungsart ersetzt hier die Randbedingungen, welche für gewöhnlich die Integration der Ausbreitungsgleichung

$$\Delta \Pi + k_0^2 \Pi = 0$$

erst zu einem bestimmten Problem machen.

Ziehen wir die Glieder $-i(\alpha x + \beta y + \gamma z)$ im Exponenten von e vor die Summe, so stellt diese eine Funktion dar, die in den Elementarparallelepipeden des Gitters periodisch ist, während die Faktoren davor:

$$e^{-i(\alpha x + \beta y + \gamma z)} = e^{-iks}$$

eine Welle von gleicher Ausbreitungskonstante k beschreiben, wie für die Dipolanregung angesetzt war.

Im Fall der Ausbreitung optischer Wellen in einem Kristall ist der letzte Faktor innerhalb eines Elementarparallelepipedons als beinahe konstant anzusehen. In der Tat ist bei einer Wellenlänge von $\lambda = 10^{-5}$ cm (im Kristall!) und der Anzahl 6.10^{23} Moleküle im Mol für einen festen Körper vom Molekulargewicht 136 ($CaSO_4$) der größte Unterschied von ks in einem Elementarbereich

$$2k.a = \frac{4\pi}{\lambda} \cdot a = 2\pi \cdot 0{,}21 \cdot 10^{-7} \cdot 10^{5} = 0{,}013,$$

das heißt, das periodische Feld wiederholt sich $\frac{2\pi}{0{,}013} = 480$ Mal im Laufe einer ganzen Schwingung des langsam veränderlichen Faktors.

Bei einem derartigen Größenverhältnis zwischen den beiden örtlich periodischen Teilen des Gesamtpotentiales werden wir nicht fehl gehen mit der Behauptung, *daß der schnellperiodische Teil des Feldes unserer Beobachtung der optischen Eigenschaften eines einfachen Raumgitters entgehen würde und nur sein Mittelwert, der durch das Glied 000 der Reihe (7) gegeben ist, in Verbindung mit dem langsam veränderlichen Faktor als optische Welle zur Beobachtung gelangt. Das Potential des optischen Feldes ist:*

8) $$\mathfrak{a}\overline{\Pi} = \mathfrak{a} \cdot \frac{\pi}{2abc} e^{-iks} \frac{1}{k^2 - k_0^2};$$

1) Vgl. A. Sommerfeld, Phys. Ztschr. XI, 1910, pg. 1057.

es stellt, mit dem Zeitfaktor e^{-int} *versehen, eine ebene Welle der Richtung* $-s$ *dar, deren Ausbreitungsgleichung nicht, wie die der einzelnen Kugelwellen, aus denen sie aufgebaut ist,* k_0, *sondern* k *als charakteristische Größe enthält:*

$$\Delta \overline{\Pi} + k^2 \overline{\Pi} = 0.$$

Die ursprünglich für die Dipolphase angesetzte Größe k selbst, resp. das Verhältnis

$$v = \frac{k}{k_0}$$

ist aus der „dynamischen Gleichgewichtsbedingung“ (10, § 2) zu bestimmen.

Der Faktor $(k_0^2 - k^2)^{-1}$ bestimmt die Amplitude a der mitschwingenden Elektronen, wenn die Intensität der beobachteten optischen Welle gegeben ist: für kleine Werte von $(k_0 - k)$, d. h. wenn der Berechnungsindex nicht viel von 1 abweicht, sind die Amplituden besonders klein; dies ist aber im Grunde nur die Umkehrung der Aussage, daß wenig mitschwingende Elektronen den Brechungsindex wenig beeinflussen.

§ 7. Zweite Summation; erregendes Feld.

Die im vorigen § abgeleitete Form des Gesamtpotentials gestattete in durchsichtiger Weise die Entstehung des optischen Feldes zu verfolgen. Speziell war das Gesamtpotential an allen Gitterpunkten in gleicher Phase e^{iks} wie die Dipole. Daher kommt es, daß wir uns zur Berechnung der Dipolschwingungen (10, § 2) auf den Dipol im Nullpunkte beschränken dürfen. Für diesen haben wir das erregende Potential, resp. dessen zweite Ableitungen zu bilden, welche mittels der Determinante 11, § 2 die Phasenkonstante k bestimmen.

An der Summe 7 des vorigen § läßt sich die Wirkung des Aufdipols 000 nicht abziehen; dies liegt daran, daß die Summe für $x = y = z = 0$ unendlich wird, indem sie ungleichmäßig konvergiert und schließlich divergiert. Der abzuziehende Beitrag $R^{-1} e^{ik_0 R}$ hingegen divergiert in ganz andrer Weise. Daher lassen sich beide Ausdrücke nicht verschmelzen, bevor sie unendlich werden. Übrigens gestattet die Form, in der Π erscheint, auch nicht eine zweimalige Differentiation.

Es ist nun besonders begrüßenswert, daß mit Hilfe des ein-

fachen Integrals für das Einzelpotential (3, § 5) sich die Summation ebenfalls ausführen läßt. Man erhält ein einfaches Integral über ein Produkt von Thetafunktionen und Exponentialfunktionen und kann am Integranden die Substraktion des unendlich werdenden Gliedes wirklich vornehmen, sodaß bei dieser Berechnung des erregenden Potentials kein Term $\infty - \infty$ auftritt. Dies ist im grunde das Verdienst der ϑ-Transformationsformel, d. h. des Umstandes, daß jede ϑ-Funktion zwei ganz verschiedene Entwickelungen zuläßt. In der einen Entwickelung stellt jedes Glied die Wirkung eines Dipols dar und deshalb kann hier der Beitrag des Aufdipols gesondert erkannt und abgezogen werden. Bei der anderen Entwickelung sind die Anteile der einzelnen Dipole ganz durcheinander geworfen und jedes Glied der Entwickelung entspricht einer der Eigenschwingungen, aus denen wir im vorigen § das Gesamtpotential aufgebaut haben. Indem nun beide Darstellungen geeignet benutzt werden, gelingt es leicht, den Anteil des Aufdipols abzuziehen und doch die wesentlichen Teile des Feldes von den andern zu trennen.

Wir gehen aus von dem Integral 3, § 5:

$$1) \qquad \frac{e^{ik_0 R}}{R} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{(0)}^{\infty} e^{-R^2 \varepsilon'^2 + \frac{k^2}{4\varepsilon'^2}} d\varepsilon';$$

in dieses führen wir eine dimensionslose Variable ε ein, indem wir setzen

$$2) \qquad \varepsilon = \frac{2d}{\sqrt{\pi}} \varepsilon', \quad \varkappa_0^2 = \frac{d^2 k_0^2}{\pi}, \quad \varkappa^2 = \frac{d^2 k^2}{\pi}, \quad P^2 = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{x^2 + y^2 + z^2}{d^2},$$

wo d eine Länge von der Größenordnung der a, b, c sei, welche wir später als das geometrische Mittel dieser Kantenlängen wählen werden. Dann ist

$$3) \qquad \frac{e^{ik_0 R}}{R} = \frac{1}{d} \int_{(0)}^{\infty} e^{-\frac{\pi}{4} \frac{\varepsilon^2}{d^2} \left\{ (X-x)^2 + (Y-y)^2 + (Z-z)^2 \right\} + \frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Die Bestimmung des § 5 über die Richtung des Auslaufens aus dem Nullpunkte wird durch die Transformation nicht geändert.

Multiplizieren wir mit dem Dipolphasenfaktor so erhalten wir das Gesamtpotential:

$$= \frac{1}{d} \sum_{l, m, n,}^{-\infty \cdots +\infty} \int_{(0)}^{\infty} e^{-\frac{\pi}{4} \frac{\varepsilon^2}{d^2} \left\{ (2al - x)^2 + (2bm - y)^2 + (2cn - z)^2 \right\} - 2ia\alpha l - 2ib\beta m - 2ic\gamma n + \frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}} d\varepsilon.$$

Der vom Summationsbuchstaben l abhängige Teil des Exponenten ist

$$-\varepsilon^2\frac{\pi a^2}{d^2}l^2+\left(\varepsilon^2\frac{\pi a x}{d^2}-2ia\alpha\right)l.$$

Die einfachste Thetafunktion (welche auch ϑ_{00} oder ϑ_3 genannt wird) läßt folgende Reihenentwickelung zu:

$$5)\qquad \vartheta(v|i\tau)=\sum_{-\infty}^{+\infty}e^{-\pi l^2\tau-2\pi i l v}.$$

Bei Vertauschung[1]) von Summations- und Integrationsfolge haben wir daher in (4)

$$\vartheta\left(\frac{\alpha a}{\pi}+i\frac{a x}{2d^2}\varepsilon^2\,\middle|\,i\frac{a^2}{d^2}\varepsilon^2\right)$$

vor uns und *das Gesamtpotential ist*

$$6)\quad\left\{\begin{aligned}\Pi=\frac{1}{d}\int_{(0)}^{\infty}&\vartheta\left(\frac{\alpha\alpha}{\pi}+\frac{i\alpha x\,\varepsilon^2}{2d^2}\,\middle|\,i\frac{a^2}{d^2}\varepsilon^2\right)\cdot\vartheta\left(\frac{b\beta}{\pi}+\frac{iby\,\varepsilon^2}{2d^2}\,\middle|\,i\frac{b^2}{d^2}\varepsilon^2\right)\cdot\\&\cdot\vartheta\left(\frac{c\gamma}{\pi}+\frac{icz\,\varepsilon^2}{2d^2}\,\middle|\,i\frac{c^2}{d^2}\varepsilon^2\right)\cdot e^{-P^2\varepsilon^2+\frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}}d\varepsilon.\end{aligned}\right.$$

Lassen wir bei der Summation den Dipol 000 aus, so fällt das Glied 000 fort und wir erhalten *das erregende Potential:*

$$7)\qquad \Pi'=\frac{1}{d}\int_{(0)}^{\infty}\{\vartheta\cdot\vartheta\cdot\vartheta-1\}e^{-P^2\varepsilon^2+\frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}}d\varepsilon.$$

Um die Integrale ausführen zu können benutzen wir die Reihenentwickelungen der ϑ. Die ursprüngliche Reihe (4) konvergiert schnell, wenn ε groß ist; eine für kleine ε brauchbare Entwickelung erhalten wir durch die ϑ-Transformationsformel[2])

1) Die Vertauschung ist scheinbar nicht erlaubt, weil die Summe der Integranden für $\varepsilon = 0$ nicht gleichmäßig konvergiert. Tatsächlich bewirkt aber der letzte Term $\frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}$ des Exponenten in Verbindung mit der Bestimmung über den Weg von ε ein derart starkes Verschwinden der einzelnen Summenglieder, daß die ungleichmäßige Art der Konvergenz nichts schadet. Man überzeugt sich hiervon, indem man den ersten Teil der Integration — von 0 bis zu dem kleinen ε_0 — fortläßt, und mit dem Integral von ε_0 bis ∞ die Rechnungen durchführt. Bei der transformierten ϑ-Reihe darf dann gerade wieder der dem Stück $0\ldots\varepsilon_0$ entsprechende Weg zugefügt werden, ohne daß Divergenz eintritt oder überhaupt der Wert des Integrals beeinflußt würde. Man hat in dem Verhalten am Punkte $\varepsilon = 0$ einen Rest der im § 3 besprochenen Konvergenzschwierigkeiten zu sehen.

2) Siehe z. B. Krazer, Lehrbuch der Thetafunktionen, p. 96. Teubner.

8)
$$\vartheta(v|i\tau) \equiv \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-\pi \frac{v^2}{\tau}} \vartheta\left(i\frac{v}{\tau}\,\middle|\,\frac{i}{\tau}\right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{-\pi \frac{v^2}{\tau}} \sum e^{-\pi \frac{l^2}{\tau} - 2\pi l \frac{v}{\tau}}.$$

Mittels der „transformierten“ und der „ursprünglichen“ Reihe ergeben sich folgende Integrale für Π:

9)
$$\Pi = \begin{cases} \dfrac{1}{d} \cdot \dfrac{d_1^3}{abc} \displaystyle\int \sum e^{-\frac{\pi}{\varepsilon^2}\left\{\left(l\frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 + \cdots\right\} - i\pi\left\{\left(l\frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)\frac{x}{d} + \cdots\right\} + \frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}} \varepsilon^{-3}\, d\varepsilon \\ \dfrac{1}{d} \displaystyle\int \sum e^{-\pi\varepsilon^2\left\{\left(l\frac{a}{d} + \frac{x}{2d}\right)^2 + \cdots\right\} - 2i(la\alpha + \cdots) + \frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}}\, d\varepsilon. \end{cases}$$

Die Integranden sind für jedes ε identisch gleich. Wir wollen abkürzend die Exponenten im ersten und zweiten Integral durch I und II bezeichnen. Dann sind die Ableitungen $\frac{\partial^2 \Pi}{\partial x^2} = \Pi_{xx}$ und $\frac{\partial^2 \Pi}{\partial x\, \partial y} = \Pi_{xy}$:

10)
$$\Pi_{xx} = \begin{cases} -\dfrac{\pi^2}{abc} \displaystyle\int \sum \left(l\frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 \cdot e^{\mathrm{I}} \varepsilon^{-3}\, d\varepsilon \\ \dfrac{1}{d^3} \displaystyle\int \sum \left\{\pi^2 \varepsilon^4 \left(l\frac{a}{d} + \frac{x}{2d}\right)^2 - \frac{\pi\varepsilon^2}{2}\right\} e^{\mathrm{II}}\, d\varepsilon. \end{cases}$$

11)
$$\Pi_{xy} = \begin{cases} -\dfrac{\pi^2}{abc} \displaystyle\int \sum \left(l\frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)\left(m\frac{d}{b} + \frac{d\beta}{\pi}\right) e^{\mathrm{I}} \cdot \varepsilon^{-3}\, d\varepsilon \\ \dfrac{1}{d^3} \displaystyle\int \sum \pi^2 \varepsilon^4 \left(l\frac{a}{d} + \frac{x}{2d}\right)\left(m\frac{b}{d} + \frac{y}{2d}\right) e^{\mathrm{II}}\, d\varepsilon. \end{cases}$$

Wir müssen nun von Π_{xx} das zweimal nach x differenzierte Einzelpotential des Aufdipols abziehen. Zu dem Zweck teilen wir die Integration, welche Π_{xx} liefert, in zwei Teile: von 0 bis E und von E bis ∞. E ist zunächst unbestimmt. Auf der ersten Weghälfte benutzen wir die Reihen mit dem Exponenten I, auf der zweiten die Reihen nach II. Abzuziehen ist (vergl. (3) dieses §)

12)
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{e^{ik_0 R}}{R} = \frac{1}{d^3} \int_{(0)}^{\infty} \left(\pi^2 \varepsilon^4 \frac{x^2}{4d^2} - \pi\frac{\varepsilon^2}{2}\right) e^{-P^2\varepsilon^2 + \frac{\varkappa_2^0}{\varepsilon^2}}\, d\varepsilon.$$

Teilen wir auch dies Integral durch die Übergangsstelle E in zwei Teile, so ist das Integral von E bis ∞ identisch mit dem Gliede 000 der zweiten Hälfte von Π_{xx}. Die Substraktion läßt sich also durch einen Akzent an der Summe ausführen und es ist, wenn wir gleichzeitig zu $x = y = z = P = 0$ übergehen

$$13)\quad \begin{cases} \Pi'_{xx} = \Pi^{(1)}_{xx} + \Pi^{(2)}_{xx}; \\ \Pi^{(1)}_{xx} = -\dfrac{\pi^2}{abc}\,\Sigma \displaystyle\int_{(0)}^{E} \left(l\frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 . e^{\mathrm{I}} . \varepsilon^{-3}\, d\varepsilon + \frac{1}{d^3}\int_{(0)}^{E} \frac{\pi\varepsilon^2}{2}\, e^{\frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}}\, d\varepsilon \\ \Pi^{(2)}_{xx} = \dfrac{1}{d^3}\,\Sigma' \displaystyle\int_{E}^{\infty} \left\{\left(l\pi\varepsilon^2\,\frac{a}{d}\right)^2 - \frac{\pi\varepsilon^2}{2}\right\} e^{\mathrm{II}}\, d\varepsilon\,, \end{cases}$$

wo die Exponenten für den Nullpunkt sind:

$$(\mathrm{I}) = -\frac{\pi}{\varepsilon^2}\left\{\left(l\frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 + \cdots\right\} + \frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}$$

$$(\mathrm{II}) = -\pi\varepsilon^2\left\{l^2\,\frac{a^2}{d^2} + \cdots\right\} - 2\,i\,(la\alpha + \cdots) + \frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}\,.$$

In $\Pi^{(1)}_{xx}$ läßt sich das allgemeine Summenglied leicht integrieren, wenn man beachtet, daß $\varepsilon^{-3}\, d\varepsilon = -\dfrac{1}{2}\, d\left(\dfrac{1}{\varepsilon^2}\right)$ ist. Das unbestimmt integrierte Glied liefert bei $\varepsilon = 0$ wegen der Richtung des Auslaufens aus dem Nullpunkt keinen Beitrag; es bleibt der Wert an der oberen Grenze E und man hat

$$14)\quad \begin{cases} \Pi^{(1)}_{xx} = \dfrac{\pi^2}{2\,abc}\,\Sigma \dfrac{\left(l\dfrac{d}{a} + \dfrac{d\alpha}{\pi}\right)^2 e^{-\frac{\pi}{E^2}\left\{\left(l\frac{d}{a} + \frac{d\alpha}{\pi}\right)^2 + \cdots\right\} + \frac{\varkappa_0^2}{E^2}}}{\varkappa_0^2 - \pi\left(l\dfrac{d}{a} + \dfrac{d\alpha}{\pi}\right)^2 - \cdots} \\ \qquad + \dfrac{\pi}{2d^3}\displaystyle\int_{(0)}^{E} e^{\frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}}\, \varepsilon^2\, d\varepsilon. \end{cases}$$

Man sieht hier deutlich den Zusammenhang mit dem Gesamtpotential in der Form des § 6. Für $E = \infty$ geht Π'_{xx} über in das (formal) differenzierte Gesamtpotential (7), § 6 genommen am Nullpunkte und vermindert um das (ebenfalls unendliche) vom Aufdipol herrührende Glied. Wird aber E im Endlichen beibehalten, so sind alle Terme endlich, weil sich der unendlich große Teil der Wirkung des Aufdipols in $\Pi^{(2)}_{xx}$ herausgehoben hat.

Durch die ganz analoge Rechnung ergibt sich:

$$15)\quad \begin{cases} \Pi'_{xy} = \Pi^{(1)}_{xy} + \Pi^{(2)}_{xy} \\ \Pi^{(1)}_{xy} = \dfrac{\pi^2}{2abc} \sum' \dfrac{\left(l\dfrac{d}{a}+\dfrac{d\alpha}{\pi}\right)\left(m\dfrac{d}{b}+\dfrac{d\beta}{\pi}\right).e^{-\frac{\pi}{E^2}\left\{\left(l\frac{d}{a}+\frac{d\alpha}{\pi}\right)^2+\cdots\right\}+\frac{\varkappa_0^2}{E^2}}}{\varkappa_0^2-\pi\left(l\dfrac{d}{a}+\dfrac{d\alpha}{\pi}\right)^2+\cdots} \\ \Pi^{(2)}_{xy} = \dfrac{\pi^2}{d^3}\dfrac{ab}{d^2}\int_E^\infty \Sigma' l\,.\,m\,.\,\varepsilon^4\,.\,e^{\Pi}\,d\varepsilon. \end{cases}$$

In $\Pi^{(1)}_{xy}$ fehlt das Integral, welches dem bei $\Pi^{(1)}_{xx}$ von der Summe abzuziehenden entspricht; dies liegt daran, daß bei der Differentiation von (3) nach x und y kein unabhängig von der Richtung unendlich werdendes Glied auftritt. Der Akzent an der Summe in $\Pi^{(2)}_{xy}$ darf nicht fortgelassen werden, da das Integral über das Glied $l = m = n = 0$ unendlich ist. Das Abziehen des einen Feldes geschieht hier so, daß nicht der Grenzwert des entstehenden Ausdruckes $0\,.\,\infty$ aufzusuchen ist, sondern das ganze Glied fortfällt.

Die Reihen (14) für $\Pi^{(1)}_{xx}$ und (13) für $\Pi^{(2)}_{xx}$ geben die zur Berechnung der Hauptbrechungsindizes nötigen Daten, soweit sie sich ohne Vernachlässigungen finden lassen. Im folgenden § werden nun die Vereinfachungen benutzt, welche die wirklichen Größenverhältnisse bei der Ausbreitung des Lichtes in festen Körpern mit sich bringen.

§ 8. Vernachlässigungen wegen der Kleinheit von $\varkappa, \varkappa_0$.

Die in § 7, (11) und (12) aufgestellten Formeln für die Ableitungen des erregenden Potentials am Orte des Dipols 000 können erheblich vereinfacht werden, wenn $\varkappa_0$, $\varkappa$ und $d.\alpha$, $d.\beta$, $d.\gamma$ kleine Zahlen sind. Dies ist stets der Fall, sobald es sich um sichtbares Licht und feste Körper handelt; nach (5), § 7, ist ja

$$\varkappa_0^2 = \frac{d^2\varkappa_0^2}{\pi} = \frac{d^2}{\pi}\cdot\left(\frac{n}{c}\right)^2 = \frac{d^2}{\pi}\cdot\left(\frac{2\pi}{\lambda_0}\right)^2 = 4\pi\frac{d^2}{\lambda_0^2},$$

wo unter $d\,(=\sqrt[3]{a\,.\,b\,.\,c}\,)$ eine Länge von der Größe der Gitterabstände a, b, c, unter n die Frequenz des Lichtes, unter λ_0 seine Wellenlänge im Vakuum verstanden ist. Ist $N = 10^{22}$ die Zahl der Moleküle und somit die Mindestzahl der Gitterpunkte im ccm, so ist

$$\frac{d}{\lambda_0} < 10^{-3}, \quad \varkappa_0^2 < 10^{-5}$$

und von gleicher Größenordnung ist $\varkappa^2$, welches aus $\varkappa_0^2$ hervorgeht, wenn die Wellenlänge λ_0 im Äther ersetzt wird durch die im Körper gemessene λ. Schließlich sei daran erinnert, daß

$$d\,.\,\alpha = d\,.\,k\cos(S,x) = \sqrt{\pi}\,\varkappa\cos(S,x),\ \ldots,\ \ldots$$

ist.

Wir sehen, daß unter diesen Umständen Terme wie $\frac{d\alpha}{\pi}$ in den Reihen (13), (14), § 7, nur dann eine Rolle spielen, wenn $l = m = n = 0$ ist. Für $\Pi_{xx}^{(1)}$ lautet das Glied 000 (vgl. hierzu die Definitionsgleichung ((2), § 7 für $\varkappa$)

$$1)\qquad \frac{\pi^2}{2abc}\frac{d^3\alpha^3}{\pi^3}\cdot\frac{1}{\varkappa_0^2-\varkappa^2} = \frac{\pi}{2abc}\frac{\varkappa^2\cos^2(S,x)}{\varkappa_0^2-\varkappa^2} = \frac{\pi}{2abc}\cdot\frac{\nu^2\cos^2(S,x)}{1-\nu^2}$$

wenn $\nu = \frac{\varkappa}{\varkappa_0}$ der Brechungsindex ist (12, § 2).

In den übrigen Gliedern der Reihe (14) darf $\alpha, \beta, \gamma, \varkappa_0$ gestrichen werden, wenn noch vorausgesetzt wird, daß $E > \varkappa_0$ ist. Wir werden die Trennungsstelle gleich 1 oder $\sqrt{\pi}$ nehmen.

Das in (14) auftretende Integral

$$\int_{(0)}^{E} e^{\frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}}\,\varepsilon^2\,d\varepsilon$$

hat wegen der Kleinheit von $\varkappa_0^2$ einen Integranden, der erst dort merklich $< \varepsilon^2$ wird, wo der Integrand ohnehin sehr klein ist. Mit sehr geringem Fehler setzen wir darum

$$2)\qquad \int_{(0)}^{E} e^{\frac{\varkappa_0^2}{\varepsilon^2}}\,\varepsilon^2\,d\varepsilon = \int_{(0)}^{E}\varepsilon^2\,d\varepsilon = \frac{E^3}{3}.$$

Dann wird

$$3)\qquad \Pi_{xx}^{(1)} = \frac{\pi}{2abc}\left\{\frac{\nu^2\cos^2(S,x)}{1-\nu^2} - \sum{}'\, l^2\frac{d^3}{a^2}\cdot\frac{e^{-\frac{\pi}{E^2}\left\{l^2\frac{d^2}{a^2}+m^2\frac{d^2}{b^2}+n^2\frac{d^2}{c^2}\right\}}}{l^2\frac{d^2}{a^2}+m^2\frac{d^2}{b^2}+n^2\frac{d^2}{c^2}} + \frac{\pi E^3}{6d^3}\right\}$$

und ebenso nach (15), § 7

$$\Pi_{xy}^{(1)} = \frac{\pi}{2abc}\left\{\frac{\nu^2\cos(S,x)\,.\,\cos(S,y)}{1-\nu^2} - \sum{}'\, l\frac{d}{a}\cdot m\frac{d}{b}\,\frac{e^{-\frac{\pi}{E^2}\left\{l^2\frac{d^2}{a^2}+\cdots\right\}}}{l^2\frac{d^2}{a^2}+m^2\frac{d^2}{b^2}+n^2\frac{d^2}{c^2}}\right\}$$

In $\Pi_{xy}^{(1)}$ heben sich in diesem Grade der Annäherung je zwei Summenglieder mit $+l$ und $-l$ auf; bei der Ausbreitung S in der yz Ebene ist sogar in aller Strenge $\Pi_{xy} = 0$, vgl. § 2. Wir setzen also

$$4) \qquad \Pi_{xy}^{(1)} = \frac{\pi}{2abc} \cdot \frac{\nu^2 \cos(S,x)\cos(S,y)}{1-\nu^2}.$$

Die analoge Betrachtung zeigt, daß in der Reihe (13) des § 7 für $\Pi_{xx}^{(2)}$ die kleinen Größen gestrichen werden dürfen, sodaß $\Pi_{xx}^{(2)}$ überhaupt unabhängig vom Brechungsindex wird. Das Glied 000, welches allein die $\alpha, \beta, \gamma \ldots$ hervortreten ließe, ist ja durch den Akzent von der Summe ausgeschlossen. Wir behalten so übrig:

$$5) \quad \Pi_{xx}^{(2)} = \frac{\pi}{d^3} \Sigma' \int_E^\infty \left(\frac{a^2 \pi \varepsilon^4 l^2}{d^2} - \frac{\varepsilon^2}{2} \right) e^{-\pi\varepsilon^2 \left\{ l^2 \frac{a^2}{d^2} + m^2 \frac{b^2}{d^2} + n^2 \frac{c^2}{d^2} \right\}} d\varepsilon.$$

Das allgemeine Integral läßt sich leicht durch die Fehlerfunktion ausdrücken. Sei die in den Lehrbüchern der Wahrscheinlichkeitsrechnung [1]) tabulierte Funktion

$$6) \qquad \Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\varepsilon^2} d\varepsilon,$$

also

$$\int_x^\infty e^{-\varepsilon^2} d\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (1 - \Phi(x)),$$

so ist durch partielle Integration leicht einzusehen, daß

$$7) \quad \begin{cases} \displaystyle\int_E^\infty e^{-\varepsilon^2 R^2} \varepsilon^2 d\varepsilon = \frac{1}{2R^2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \frac{1-\Phi(ER)}{R} + E e^{-E^2 R^2} \right\} \\ \displaystyle\int_E^\infty e^{-\varepsilon^2 R^2} \varepsilon^4 d\varepsilon = \frac{3}{4R^5} \frac{\sqrt{\pi}}{2} (1-\Phi(ER)) + \left(\frac{3}{4R^4} E + \frac{E^3}{2R^2} \right) \cdot e^{-E^2 R^2}. \end{cases}$$

Für uns ist

$$R^2 = \pi \left\{ l^2 \frac{a^2}{d^2} + m^2 \frac{b^2}{d^2} + n^2 \frac{c^2}{d^2} \right\}$$

und

$$8) \quad \Pi_{xx}^{(2)} = \frac{\pi}{4d^3} \sum{}' \left\{ \frac{E e^{-E^2 R^2}}{R^2} \left[\left(\frac{3}{R^2} + 2E^2 \right) \frac{a^2 \pi l^2}{d^2} - 1 \right] + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1-\Phi(ER)}{R^3} \left(\frac{3}{R^2} \frac{a^2 \pi l^2}{d^2} - 1 \right) \right\}$$

---

1) Z. B. A. Meyer, Vorles. über Wahrscheinlichkeitsrechnung. Übers. von Czuber, Teubner 1879.

Aus § 7 (11 b) erkennt man, daß nach Streichung der $\alpha, \beta, \gamma \ldots$ $\Pi_{xy}^{(2)} = 0$ ist.

Wir werden die Reihen (3) und (8) für Π'_{xx} später zur numerischen Berechnung brauchen. Hierzu muß die *Übergangsstelle* E in zweckmäßiger Weise gewählt werden, sodaß der Fehler, der bei Benutzung weniger Reihenglieder natürlich von E abhängt, möglichst gering wird. Für die Abnahme der Größe der Einzelglieder in den Reihen (3) und (8) sind die Exponentialterme am wichtigsten. Wir kommen mit der geringsten Gliederzahl in beiden Reihen aus, wenn beide Exponenten von e gleich schnell negativ werden; es soll also sein, wenn einmal Brüche wie $\frac{a}{d} = 1$ gesetzt werden:

$$e^{-\frac{\pi}{E^2}(l^2+m^2+n^2)} = e^{-\pi E^2(l^2+m^2+n^2)}$$

d. h.

$$E = 1. \tag{9}$$

Mit diesem Wert der Übergangsstelle erreichen wir die nötige Genauigkeit mit der kleinsten Anzahl Glieder sowohl von (3) wie von (8).

Andrerseits ist es manchmal bequemer, die umständlichere Entwicklung (8) zu vermeiden, indem mehr Glieder von (3) berücksichtigt werden. Dann wird $E = \sqrt{\pi}$ ein geeigneter Wert sein, da einige π-Faktoren in der ersten Reihe fortfallen und das größte Glied der zweiten Reihe von der Ordnung

$$e^{-\pi^2} = 0{,}0^4 5$$

wird, also bereits vernachlässigt werden kann.

Fürs erste interessiert uns wesentlich das von ν unabhängige Glied und wir schreiben

$$\left\{\begin{array}{l} \Pi'_{xx} = \dfrac{\pi}{2abc}\left(\dfrac{\nu^2\cos^2(S,y)}{1-\nu^2} + \psi_{xx}\right) \\ \Delta\Pi' = \dfrac{\pi}{2abc}\left(\dfrac{\nu^2}{1-\nu^2} + \Delta\psi\right), \end{array}\right. \tag{10}$$

wo das dimensionslose ψ allein von den a, b, c abhängt.

§ 9. Die Dispersionsformel.

In § 2 hatten wir 6 Fälle zur Berechnung der Hauptbrechungsindizes unterscheiden müssen, je nach der Richtung von Schwingung und Strahl. Schreiben wir die Bestimmungsgleichung bei Ausbreitung der optischen Welle in der z-Richtung und Schwin-

gung in der x-Richtung auf:

$$\Omega + (\Delta\Pi' - \Pi'_{xx})_{\substack{\alpha=\beta=0\\ \gamma=k}} = \Omega + \frac{\pi}{2abc}\left(\frac{\nu_{xz}^2}{1-\nu_{xz}^2} + \Delta\psi - \psi_{xx}\right) = 0$$

so sehen wir, daß in unserer Annäherung wegen der Unabhängigkeit der ψ von der Richtung des Strahles die identische Gleichung auch für ν_{xy}, d. h. bei $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = k$, gelten würde. *Wir lassen deshalb den Unterschied zwischen ν_{xy} und ν_{xz} fort, indem wir ν_x für den Hauptbrechungsindex bei Schwingungen längs der x-Axe schreiben.*

Nennen wir v das einen Dipol enthaltende Volumen $8abc$, so haben wir für den Brechungsindex die Gleichung

1) $$\frac{\nu_x^2}{\nu_x^2 - 1} = \frac{v}{4\pi}\Omega + \Delta\psi - \psi_{xx}$$

oder

2) $$\nu_x^2 = 1 + \frac{1}{\frac{v}{4\pi}\Omega + \Delta\psi - \psi_{xx} - 1}.$$

Erinnern wir uns der Bedeutung der Elektronenkonstanten Ω (9, § 2)

$$\Omega = \frac{m}{e^2}\left(n_0^2 - n^2 - in\frac{g}{m}\right);$$

dabei soll, um durchsichtige Kristalle zu betrachten, der Reibungskoeffizient $g = 0$ gesetzt werden. Dann ist *die Dispersionsformel:*

3) $$\nu_x^2 = 1 + \frac{1}{\frac{v}{4\pi}\frac{m}{e^2}n_0^2 - (1 - \Delta\psi + \psi_{xx}) - \frac{v}{4\pi}\frac{m}{e^2}n^2}$$

4) $$= 1 + \frac{1}{B_x - An^2};$$

oder unter Einführung der Wellenlänge $\lambda = \frac{2\pi c}{n}$:

5) $$\nu_x^2 = 1 + \frac{\lambda^2}{\lambda^2 B_x - 4\pi^2 c^2 A}.$$

Wir haben hier eine Dispersionsformel mit zwei Konstanten vor uns, von gleicher Bauart, wie die H. A. Lorentzsche[1]) und die Plancksche[1]) Formel. Letztere lautet in unseren Bezeichnungen

1) Zitate unter § 4.

$$n^2 = 1 + \frac{1}{\frac{v}{4\pi}\frac{m}{e^2}n_0^2 - \frac{1}{3} - \frac{v}{4\pi}\frac{m}{e^2}n^2},$$

während Lorentz $-(\frac{1}{3}+s)$ statt $-\frac{1}{3}$ hat, wobei s unbestimmt bleibt. In allen 3 Formeln bedeutet dieser Term den Einfluß der Dipole im Körper auf einen Aufdipol. Der Teil $\frac{1}{3}$ stammt von der zu einem homogenen Medium ausgebreiteten weiteren Umgebung des Aufdipols, während in Lorentz's s die unbestimmte Einwirkung der Nachbarmoleküle berücksichtigt ist. Für den Fall kubischer Anordnung der Nachbarmoleküle zeigt H. A. Lorentz daß $s = 0$ wird, sodaß seine Formel mit der Planckschen identisch wird. Auch bei uns ergibt die Ausrechnung des Gliedes

$$1 - \Delta\psi + \psi_{xx} = 1 - \psi_{yy} - \psi_{zz} = 1 - 2\,.\,\psi_{yy}$$

für den Fall $a = b = c$ innerhalb der Genauigkeitsgrenze der Rechnung den gleichen Wert $\frac{1}{3}$, *sodaß, wenn der isotrope Körper durch eine kubische Anordnung ersetzt werden darf, unsere Formel gänzlich mit der Lorentz-Planckschen übereinstimmt.*

Die Diskussion der erhaltenen Dispersionsformel würde, was Abhängigkeit des Brechungs- und Absorptionsindex von der Wellenlänge betrifft, nichts anderes ergeben, als was bereits von Planck ausgeführt wurde.

Nur was die Besonderheiten, die durch die Anisotropie der Formel (3) entstehen, betrifft, soll hier folgendes bemerkt werden:

1) Aus 2 Messungen von r_x können A und B_x (Formel 4) berechnet werden. Da die ψ durch die Kantenlängen des Gitters gegeben sind, *so erhält man unter Benutzung der Werte eines Hauptbrechungsindex bei 2 verschiedenen Wellenlängen die vollständige Dispersionsformel nicht nur für diesen Index, sondern auch für die beiden anderen Hauptbrechungsindizes.*

2) Berechnet man die Konstante A, die bei uns stets gleich $\frac{v}{4\pi}\frac{m}{e^2}$ ist, bei einem Kristall für die drei Hauptbrechungsindizes α, β, γ getrennt, so erhält man verschiedene Werte, z. B. bei Anhydrit

$$A_\alpha = 1{,}6125\,.\,10^{-33}, \quad A_\beta = 1{,}6726\,.\,10^{-33}, \quad A_\gamma = 1{,}5501\,.\,10^{-33}.$$

Die Größenordnung 10^{-33} entspricht unserer Interpretation der Konstanten: hätte aber Anhydrit die zugrundegelegte einfache Gitterstruktur, so müßte $A_\alpha = A_\beta = A_\gamma$ sein. Diese Voraussetzung kann in Wirklichkeit nicht erfüllt sein, weil Anhydrit schwingungsfähige Jonen enthält; die Strukturtheorie läßt sogar die Möglichkeit offen, daß bereits das Elektronengitter komplizierter

ist, als das hier angenommene Bravais'sche Raumgitter. Im zusammengesetzten System wird an Stelle von (3) eine kompliziertere Formel treten (siehe letzten §), in welcher die Lage der einzelnen elementaren Gitter des Punksystems gegeneinander — und somit mehr als zwei Konstanten — vorkommen. Die zweikonstantige Formel (3) ist dann als Annäherung an diese Formel komplizierterer Bauart aufzufassen und die Konstante A der Dispersion verliert hierbei ihre einfache Bedeutung und kann von der Ausbreitungsrichtung der Welle abhängen. Hierher gehört die Bemerkung von Drude[1]), daß im Kalkspath bei Einfall senkrecht zur optischen Axe auf den ordentlichen Strahl *scheinbar* 5, auf den außerordentlichen 2 Elektronen pro Molekül mitschwingen.

3) Aus der Formel (3) geht ohne weiteres hervor, daß die Wirkung der Gitterstruktur auch aufgefaßt werden kann *wie eine anisotrope Lagerung der Elektronen in den Molekülen.* Die Änderung der Dispersionsformel, welche beim Übergang von ν_x zu ν_y resp. von ψ_{xx} zu ψ_{yy} stattfindet, kann ja beschrieben werden durch eine Abänderung der Eigenschwingung n_0. Wir können den Lagerungseffekt direkt so auffassen, daß infolge der verschiedenen Rückwirkungen der Nachbardipole auf den Aufdipol bei dessen Verrückung aus der Ruhelage die quasielastische Kraft, die ihn zurückzuführen sucht, in den 3 Axenrichtungen ungleich groß wird, d. h. innerhalb des Gitterverbandes besitzt ein Dipol durch den Einfluß der Struktur von selbst 3 verschiedene Eigenschwingungsdauern und Frequenzen. So ist gezeigt, daß im Prinzip die beiden Ansichten, von denen die eine die Doppelbrechung auf Anisotropie der kleinsten Teilchen, die andere auf die anisotrope Lagerung der isotrop gedachten kleinsten Teilchen zurückführen will, in ihrer Wirkung gleich sind.

§ 10. Die Gleichung der Normalenfläche.

Wir haben uns bisher ausschließlich mit den Hauptbrechungsindizes beschäftigt, deren wir ursprünglich 6 unterscheiden mußten. Mit geringen Vernachlässigungen erkannten wir je zwei, die sich auf den gleichen Polarisationszustand beziehen, als einander gleich, sodaß die Eigenschaften des Gitters in dieser Hinsicht mit denen eines zweiaxigen Kristalles übereinstimmen.

Es fragt sich, ob dies für alle Richtungen gilt, d. h. *ob die Beziehung zwischen Richtung der Wellennormalen S und dem Brechungs-*

1) Drudes Annalen XIV (1904), pg. 691.

index, welche in der Determinante (11, § 2) enthalten ist, von der gleichen Art ist, wie bei rhombischen Kristallen.

Indem wir die angenäherten Werte in die Determinante eintragen, wird ihre erste Reihe

$$\Omega + \frac{\pi}{2abc}\left(\frac{\nu^2}{1-\nu^2}(1-\cos^2(s,x)) + \Delta\psi - \psi_{xx}\right)$$

$$-\frac{\pi}{2abc}\frac{\nu^2}{1-\nu^2}\cos(s,x)\cos(s,y) \quad -\frac{\pi}{2abc}\frac{\nu^2}{1-\nu^2}\cos(s,x)\cos(s,z).$$

Führen wir die Abkürzungen

$$N = \frac{\nu^2}{1-\nu^2}, \quad \cos(s,x) = \cos 1, \ldots$$

ein und ersetzen

$$\frac{2abc}{\pi}\Omega + \Delta\psi - \psi_{xx} = \frac{\nu_x^2}{1-\nu_x^2} = N_x$$

durch seinen Wert N_x, so lautet die Determinante:

$$\begin{vmatrix} N\sin^2 1 - N_x & -N\cos 1\cos 2 & -N\cos 1\cos 3 \\ -N\cos 1\cos 2 & N\sin^2 2 - N_y & -N\cos 2\cos 3 \\ -N\cos 1\cos 3 & -N\cos 2\cos 3 & N\sin^2 3 - N_z \end{vmatrix} = 0.$$

Entwickeln wir und benutzen die Relation

$$\cos^2 1 + \cos^2 2 + \cos^2 3 = 1,$$

welche zwischen den 3 Richtungscosinus der Wellennormale besteht, so sehen wir, daß der Koeffizient von N^3 Null ist, und wir behalten

$$N^2(N_x\cos^2 1 + \cdots) - N(N_y N_z \sin^2 1 + \cdots) + N_x N_y N_z = 0.$$

Ersetzt man nun N und $N_x, \ldots$ durch ihre Werte $\frac{\nu^2}{1-\nu^2}, \cdots$ und schafft die Nenner fort, so entsteht

$$\nu^4\{\nu_x^2(1-\nu_y^2)(1-\nu_z^2)\cos^2 1 + \cdots\} - \nu^2(1-\nu^2)\{\nu_y^2\nu_z^2(1-\nu_x^2)\sin^2 1 + \cdots\}$$
$$+ (1-\nu^2)^2\nu_x^2\nu_y^2\nu_z^2 = 0.$$

oder

$$\nu^4(\nu_x^2\cos^2 1 + \cdots) - \nu^2(\nu_y^2\nu^2\sin^2 1 + \cdots) + \nu_x^2\nu_y^2\nu_z^2 = 0.$$

Diese Beziehung zwischen der Richtung s der Wellennormalen und dem Brechungsindex ν ist identisch mit der Gleichung der Normalenfläche bei zweiaxigen Kristallen, welche gewöhnlich in der Form geschrieben wird

$$\frac{\nu_x^2 \cos^2 1}{\nu^2 - \nu_x^2} + \frac{\nu_y^2 \cos^2 2}{\nu^2 - \nu_y^2} + \frac{\nu_z^2 \cos^2 3}{\nu^2 - \nu_z^2} = 0.$$

Wir sehen hierdurch, daß ein Punktgitter der betrachteten Art, sich bereits nach allen Richtungen wie ein Kristall verhält.

Es darf vielleicht darauf hingewiesen werden, daß dies Resultat nicht selbstverständlich ist. Die Verschiedenheit der Richtungen könnte im Gitter so viel stärker sein, als in wirklichen Kristallen, die aus mehreren Gittern zusammengesetzt sind, daß die Normalenfläche des Gitters noch zu wenig abgerundet wäre, um in dieser genauen Annäherung als gleichartig mit der beobachteten erkannt zu werden. Das Gitter könnte z. B. die geringere Symmetrie aufweisen, welche rhombische Kristalle für die Fortpflanzung akustischer Wellen besitzen.

Ferner zeigt dies Resultat, daß vom qualitativen optischen Gesichtspunkt aus nichts gegen eine noch so einfache Gittervorstellung der Kristalle einzuwenden ist.

§ 11. Die Doppelbrechung D.

Bereits in den allgemeinen Betrachtungen des § 2 war auf eine Beziehung zwischen den Hauptbrechungsindizes hingewiesen worden, welche hieß

1) $$(\Delta\Pi' - \Pi'_{xx})_{a_x,\,\gamma} = (\Delta\Pi' - \Pi'_{yy})_{a_y,\,\gamma}.$$

Die Klammern sollten daran erinnern, daß die Potentiale sich beiderseits auf den Fall der Ausbreitung des Feldes längs z (allein $\gamma \neq 0$) beziehen, daß aber links der Brechungsindex ν_x für Schwingungen $a = a_x$, rechts ν_y gemeint ist.

Setzen wir in diese Beziehung die angenäherten Werte (10 § 8) ein, so entsteht

$$\frac{\pi}{2abc}\left(\frac{\nu_x^2}{1-\nu_x^2} + \Delta\psi - \psi_{xx}\right) = \frac{\pi}{2abc}\left(\frac{\nu_y^2}{1-\nu_y^2} + \Delta\psi - \psi_{yy}\right)$$

oder da $\Delta\psi$ in beiden Fällen das gleiche ist:

2) $$\frac{\nu_x^2 - \nu_y^2}{(1-\nu_x^2)(1-\nu_y^2)} = \psi_{xx} - \psi_{yy} = \mathbf{D}_{xy}.$$

Die links stehende Zahl, welche bereits von T. H. Havelock als unabhängig von der Wellenlänge erkannt wurde, finden wir überhaupt nur abhängig von den Verhältnissen $a : b : c$ des Gitters und nennen sie das Maaß der strukturellen Doppelbrechung. Durch unsere Reihen sind wir in der Lage, sie für beliebige Werte a : b : c zu berechnen.

Wir dürfen, wie schon in § 1 betont, von der numerischen Rechnung nichts anderes erwarten, als eine Bestimmung der *Größenordnung des Gittereffektes*; der wirkliche Kristall ist für die optischen Eigenschaften kein so einfaches Raumgitter, wie hier vorausgesetzt. Nehmen wir selbst den Kristall, Anhydrit ($Ca\,SO_4$, $a : b : c = 0{,}8932 : 1 : 1{,}0008$), dem man wegen seiner Kohäsionsverhältnisse (spaltbar längs [010], [001], [100]) den einfachen Aufbau nach dem hier behandelten Gitter zusprechen dürfte, so ist aus den Erfahrungen der Drudeschen Dispersionstheorie mit großer Wahrscheinlichkeit zu schließen, daß jedes Molekül mehrere mitschwingende Elektronen enthält, deren Anzahl in einem gewissen Zusammenhang mit der Zahl der Valenzen im Molekül steht. Das aus der Spaltbarkeit gewonnene Gittermodell bezieht sich offenbar auf Molekülschwerpunkte, da man nicht annehmen wird, daß bei der Spaltung der chemische Aufbau des Körpers gestört wird. Über die Verteilung der Resonatoren um diese Gitterpunkte erhalten wir aber keinen weiteren Aufschluß und doch ist sie gerade von bedeutendem Einfluß auf die Doppelbrechung. Immerhin dürfen wir annehmen, daß die Größenordnung des Gittereffektes unabhängig von der Anordnung im einzelnen ist.

Die Formel zur Berechnung von $\mathbf{D}_{xy}$ folgt aus § 8, (3) und (8) indem man, wie am Ende des § 8 erklärt, für möglichste Genauigkeit der Berechnung $E = 1$ setzt. Man behält die Trennung in 2 Teile, wie bei $\Pi^{(1)}_{xx}$ und $\Pi^{(2)}_{xx}$ bei und erhält

$$3\,a)\quad \mathbf{D}^{(1)}_{xy} = -\sum{}'\left(l^2\frac{d^2}{a^2} - m^2\frac{d^2}{b^2}\right)\cdot\frac{e^{-\pi\left(l^2\frac{d^2}{a^2}+m^2\frac{d^2}{b^2}+n^2\frac{d^2}{c^2}\right)}}{l^2\frac{d^2}{a^2}+m^2\frac{d^2}{b^2}+n^2\frac{d^2}{c^2}}$$

$$3\,b)\quad \mathbf{D}^{(2)}_{xy} = \frac{\pi}{2}\sum{}'\frac{\frac{a^2}{d^2}-m^2\frac{b^2}{d^2}}{R^2}\left\{e^{-R^2}\left(\frac{3}{R^2}+2\right)+\frac{3\sqrt{\pi}}{2}\,\frac{1-\Phi(R)}{R^3}\right\}$$

$$\mathbf{D}_{xy} = \mathbf{D}^{(1)}_{xy} + \mathbf{D}^{(2)}_{xy}.$$

Die Ausrechnung mit dem Verhältnis a : b : c wie bei Anhydrit ergab:

$$\mathbf{D}_{xy} = 0{,}17848 \quad \mathbf{D}_{xz} = 0{,}17983 \quad \mathbf{D}_{yz} = 0{,}00133,$$

während aus den Brechungsexponenten des Anhydrit für Na-licht,

$$\nu_\alpha = 1{,}5693 \quad \nu_\beta = 1{,}5752 \quad \nu_\gamma = 1{,}6130,$$

folgt

$$\mathbf{D}_{\beta\alpha} = 0{,}05145 \quad \mathbf{D}_{\gamma\alpha} = 0{,}05925 \quad \mathbf{D}_{\gamma\beta} = 0{,}00854.$$

Die berechneten Werte sind also nach zwei Richtungen 3 bis $3\,^1/_2$ mal größer, nach der dritten Richtung 6 mal kleiner als die beobachteten Zahlen. Diese Abweichungen ließen sich zweifellos durch geschicktes Einschieben eines zweiten Raumgitters erheblich verbessern und schon die angeführten Zahlen dürfen als Beweis dafür angesehen werden, *daß die anisotrope Anordnung isotroper Dipole genügt, um Doppelbrechung der beobachteten Größe zu erklären.*

Es muß nun noch darauf hingewiesen werden, daß der Ausdruck **D** *nur bis zu einem gewissen Grade unabhängig von der Wellenlänge* gefunden wird. Ob seine Konstanz in beliebig zusammengesetzten Punktsystemen aus gleichen Elektronen gilt, möge dahingestellt bleiben; sicherlich gilt sie nicht in einem aus verschiedenartigen Jonengittern zusammengesetzten Punktsystem, da es nicht möglich ist, aus den zwei Dispersionsgleichungen für ν_x und ν_y die 2 oder mehr Elektronenkonstanten Ω_i zu eliminieren.

Ein besonders günstiges Beispiel für die Konstanz von **D** ist der schon von Havelock angeführte Quarz, weil dessen infrarote Eigenfrequenzen sehr wenig Einfluß auf das sichtbare Spektrum haben. Bei Quarz ist die Änderung von **D** zwischen den Linien C und E des Spektrums 15 mal geringer, als die Änderung der Doppelbrechung $(\omega - \varepsilon)$ im gewöhnlichen Sinne. Bei den meisten anderen Krystallen ist **D** nur 3 bis 6 mal weniger veränderlich als $(\gamma - \alpha)$; es kommen auch solche vor (Aragonit), bei denen die Dispersion der Doppelbrechung $(\gamma - \alpha)$ geringer ist als die Inkonstanz von **D**.

Leider werden, wie wir im nächsten § sehen werden, die Formeln für 2 Elektronengattungen bereits ziemlich kompliziert, sodaß keine einfache Beziehung zwischen den 3 Hauptbrechungsindizes anzugeben ist, welche unabhängig von der Wellenlänge geltung hat.

§ 12. Einfluss der roten Eigenschwingungen.

Es bietet keine prinzipiellen Schwierigkeiten, die Untersuchung auf mehrere ineinandergestelte Raumgitter des betrachteten einfachen Typus auszudehnen. Da für die Berechnung der optischen Verhältnisse eines wirklichen Krystalles derartige kompliziertere Gittervorstellungen benutzt werden müssen, so sollen im Schlußparagraphen die Formeln für solche Gitter aufgestellt werden.

Als Übergang dazu und als Ergänzung der bisherigen Be-

trachtungen, soll jetzt *der Einfluß eines zweiten Gitters untersucht werden, in dessen Gitterpunkten Jonen schwingen können.*

Bezeichnen wir das Potential des Elektronengitters mit $\mathfrak{a}_1 \Pi_1$ das des Jonengitters mit $\mathfrak{a}_2 \Pi_2$, so sind die zwei vektoriellen Schwingungsgleichungen für Elektronen (Konstante Ω_1) und Jonen (Ω_2) zu erfüllen:

$$1) \qquad \begin{aligned} \mathfrak{a}_1 \Omega_1 &= \text{rot rot}\,(\mathfrak{a}_1 \Pi_1' + \mathfrak{a}_2 \Pi_2)_{p_1}, \\ \mathfrak{a}_2 \Omega_2 &= \text{rot rot}\,(\mathfrak{a}_1 \Pi_1 + \mathfrak{a}_2 \Pi_2')_{p_2}. \end{aligned}$$

Die erste dieser Gleichungen gilt am Punkte p_1 des ersten, die zweite im Punkte p_2 des zweiten Gitters. Beschränken wir uns sofort auf den Fall des Hauptbrechungsindex ν_x, indem wir annehmen, daß Differentialquotienten wie Π'_{xy} an allen Punkten des Systems aus Symmetrie fortfallen [1]). Wir haben dann

$$5) \qquad \left\{ \begin{aligned} \mathfrak{a}_{1x}(\Omega_1 + (\Delta\Pi_1' - \Pi'_{1xx})_{p_1}) &= \mathfrak{a}_{2x}(\Pi_{2xx} - \Delta\Pi_2)_{p_1} \\ \mathfrak{a}_{2x}(\Omega_2 + (\Delta\Pi_2' - \Pi'_{2xx})_{p_2}) &= \mathfrak{a}_{1x}(\Pi_{1xx} - \Delta\Pi_1)_{p_2} \end{aligned} \right.$$

gleichzeitig zu erfüllen; dies gibt bei Elimination von $\frac{\mathfrak{a}_2}{\mathfrak{a}_1}$

$$3) \qquad \Omega_1 + (\Delta\Pi_1' + \Pi'_{1xx})_{p_1} = \frac{(\Pi_{2xx} - \Delta\Delta_2)_{p_1}\,(\Delta_{1xx} - \Delta_1)_{p_2}}{\Omega_2 + (\Delta\Pi_2' - \Pi'_{2xx})_{p_2}}.$$

Um dimensionslose Größen zu bekommen, multiplizieren wir beiderseits mit $\frac{2abc}{\pi}$ (vergl. die Einführung der dimensionslosen ψ auf S. 32, § 8); dann treten

$$\Omega_1 \cdot \frac{2abc}{\pi} = \frac{v}{4\pi}\left(\frac{m}{e^2}(n_0^2 - n^2)\right)_1, \quad \Omega_2 \cdot \frac{2abc}{\pi} = \frac{v}{4\pi}\left(\frac{m}{e^2}(n_0^2 - n^2)\right)_2$$

auf, über deren Größe wir uns orientieren müssen. $\frac{v}{4\pi}\Omega_1$ ist von der Größenordnung 1; aus dem S. 34 mitgeteilten Wert der Dispersionskonstante

$$A = \frac{v}{4\pi}\left(\frac{m}{e^2}\right)_1 = 1{,}6 \,.\, 10^{-33}\ [\text{sec}^2]$$

folgt mit $(n_0^2)_1 = 4 \,.\, 10^{32}\ [\text{sec}^{-2}]$ (Eigenwellenlänge 1000 $\mathring{A}E$), da $n \ll n_0$,

---

1) Dies ist der Fall, wenn die Jonen die Elektronenparallelepipeda zentrieren.

$$\frac{v}{4\pi}\,\Omega_1 = 0{,}64.$$

Ferner ist für gelbes Licht

$$\frac{\Omega_2}{\Omega_1} = \frac{m_2}{m_1}\frac{n^2}{n_{01}^2} = 80,$$

wenn die Ladungen $e_1 = e_2$, die Massen $m_2 = 2000 \cdot m_1$ angenommen werden. Da die $\frac{v}{4\pi}\,\Delta\Pi$ etc., wie die Ausrechnung zeigt (vgl. die Reihen in § 8) sich nicht weit von der Einheit entfernen (es sei denn daß ν nahe gleich 1 wird), so ist die rechte Seite der Gleichung (3) im allgemeinen eine kleine Zahl ($\frac{1}{80}$) und ihre Änderung mit der Wellenlänge ist auch gering. Daher läßt sich der Unterschied der Gleichung (3) für zwei Gitter gegen die Gleichung für ein einziges Gitter, welche auf der rechten Seite von (3) Null haben würde, dadurch beschreiben, daß Ω_1 durch das Ionengitter abgeändert wird, in dem Sinne *daß durch Hinzutreten des Ionengitters die scheinbare Eigenfrequenz des Elektronengitters erhöht wird.* Für die Dispersionsformel (3), § 9, bedeutet dies eine Vergrößerung der Konstanten B und es ist verständlich, wieso diese Formel trotz der Anwesenheit des Jonengitters die Dispersion innerhalb eines großen Bereiches richtig wiedergibt.

Auf das Vorzeichen der Änderung von n_{01} schließt man daraus, daß der Zähler in (3) ein Quadrat ist:

$$(\Pi_{2xx} - \Delta\Pi_2)_{p_1}(\Pi_{1xx} - \Delta\Pi_1)_{p_2} = (\Pi_{1xx} - \Delta\Pi_1)^2_{p_2}$$

(vgl. (3) im nächsten §) und weil Ω_2 selbst negativ, Ω_1 positiv sein muß, wenn $n_{01} > n > n_{02}$.

Die Dispersionsformel, welche man aus (3) erhält, ist folgende: es sei abkürzend

4) $$a_{12} = (\Delta\psi_1 - \psi_{1xx})_{p_2}, \quad a_{11} = (\Delta\psi_1' - \psi_{1xx}')_{p_1}, \ldots$$

d. h. a_{ik} gleich dem Teil des vom $i$ten Gitter zum Punkte des $k$ten Gitters gewandten Feldes, der von ν unabhängig ist. Dann ist

5) $$\frac{\nu^2}{1-\nu^2} = \frac{(\Omega_1 + a_{11})(\Omega_2 + a_{22}) - a_{12} \cdot a_{21}}{\Omega_1 + \Omega_2 + a_{11} + a_{22} - a_{12} - a_{21}}$$

oder, wenn für $\Omega_{1,2}$ die Werte eingesetzt werden:

6) $$\nu^2 = 1 + \frac{A - Bn^2}{Cn^4 - Dn^2 + E};$$

von den 5 Konstanten dieser Dispersionsformel sind nur 4 unabhängig, entsprechend den unbekannten Größen $\frac{m_1}{e^2}$, $\frac{m_2}{e^2}$, n_{01}^2, n_{02}^2 (Eigenfrequenzen). Die Konstanten haben nämlich mit den obigen Bezeichnungen die Bedeutungen

$$7) \quad \begin{cases} B = \omega_1 + \omega_2, \quad C = \omega_1 \omega_2 \quad \left(\omega = \frac{v}{4\pi} \frac{m}{e^2}\right) \\ A = \omega_1 n_{01}^2 + \omega_2 n_{02}^2 + 2(a_{11} - a_{12}) \\ D = C.(n_{01}^2 + n_{02}^2) + B(a_{11} + 1) \\ E = C n_{01}^2 n_{02}^2 + (a_{11} + 1) A - (a_{11} - a_{12})^2. \end{cases}$$

Die Größe der a_{12} hängt von der gegenseitigen Lage des Ionen- und Elektronengitters ab. Falls a_{21} und $a_{12} \ll a_{11}$ sind, kann (5) geschrieben werden

$$\frac{1}{\nu^2} - 1 = \frac{1}{\Omega_1 + a_{11}} + \frac{1}{\Omega_2 + a_{22}}.$$

Dies erinnert an die Drudesche Dispersionsformel für mehrere Ionengattungen, deren einzelne Summanden je den Einfluß einer Ionenart wiedergeben. Die Vernachlässigung von a_{12} bedeutet, daß wir von der gegenseitigen Einwirkung der Gitter aufeinander absehen können. Die gleiche Voraussetzung liegt den Drudeschen Rechnungen zugrunde.

§ 13. Brechungsindex eines „Punktsystems".

In diesem § soll der Weg gezeigt werden, wie der Brechungsindex eines wirklichen Kristalles berechnet werden kann, wenn die m einzelnen Gitter, aus denen sein „Punktsystem" besteht, kongruente rechtwinklige Parallelepipeda haben.

Wir müssen dazu das Potential eines Punktgitters an einem beliebigen Aufpunkt kennen. Dies wird durch die Formeln (3), (8) und (4) des § 7 gegeben.

Wir wählen ein beliebiges Koordinatensystem, dessen Axen mit den Axen des Punktsystems der Richtung nach zusammenfallen und charakterisieren die m Raumgitter durch die m dem Nullpunkt nächsten Punkte $p_i = (X_i\, Y_i\, Z_i)$. An jedem der Punkte p_i ist eine Schwingungsgleichung

$$1) \qquad \mathfrak{a}_i \Omega_i = (\text{rotrot}\ \Sigma \mathfrak{a}_h \Pi_h)_{p_i}$$

zu erfüllen, wobei unter Π_i am Punkte p_i natürlich das früher mit einem Akzent bezeichnete erregende Potential zu verstehen ist.

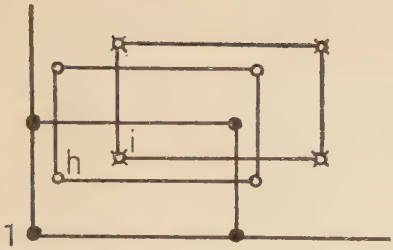

Fig. 5.

Wir können nun den Wert des $h$ten Potentials am $i$ten Gitterpunkt durch einen Wert des ersten Potentials ausdrücken. Sieht man nämlich von dem verschwindend kleinen Phasenunterschied der Gitter untereinander ab, so ist das Potential $(\Pi_h)_{p_i}$ gleich dem Potential des ersten Gitters an dem Punkte, der gegen p_1 so liegt wie p_i gegen p_h. Legen wir also das Koordinatensystem in das Axensystem des ersten Gitters, so ist, wenn der Index 1 bei Π_1 gleich fortgelassen wird,

2) $$(\Pi_h)_{p_i} = (\Pi)_{(p_i - p_h)}$$

und da Π gerade ist,

3) $$(\Pi_h)_{p_i} = (\Pi)_{p_h - p_i} = (\Pi_i)_{p_h}.$$

Das gleiche gilt von den Ableitungen und wir haben die m Schwingungsgleichungen

$$\mathfrak{a}_i \mathfrak{Q}_i = \sum_{h=0}^{m} \text{rotrot}\, \mathfrak{a}_h \Pi_{p_h - p_i}, \qquad i = 0, 1, \ldots m.$$

Die erste dieser $3m$ Gleichungen für die einzelnen Komponenten heißt:

$$\begin{aligned} \mathfrak{a}_{1x} \mathfrak{Q}_1^{\cdot} = & -\mathfrak{a}_{1x}(\Delta\Pi - \Pi_{xx})_0 + \mathfrak{a}_{1y}(\Pi_{xy})_0 + \mathfrak{a}_{1z}(\Pi_{xz})_0 \\ & - \mathfrak{a}_{2x}(\Delta\Pi - \Pi_{xx})_{p_2} + \mathfrak{a}_{2y}(\Pi_{xy})_{p_2} + \cdots \end{aligned}$$

Ordnen wir die Reihenfolge der Amplituden so:

$$\mathfrak{a}_{1x}\, \mathfrak{a}_{2x} \ldots \mathfrak{a}_{mx} \quad \mathfrak{a}_{1y}\, \mathfrak{a}_{2y} \ldots \mathfrak{a}_{my} \quad \mathfrak{a}_{1z} \ldots \mathfrak{a}_{mz},$$

so erhalten wir die Bedingung für das Bestehen der $3m$ homogenen Gleichungen in Form einer $3m$-reihigen Determinante

$$\begin{vmatrix} \mathfrak{Q}_1 + (\Delta\Pi - \Pi_{xx})_0 \ldots & (\Delta\Pi - \Pi_{xx})_{p_m} & -(\Pi_{xy})_0 & \ldots & -(\Pi_{xz})_{p_m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ (\Delta\Pi - \Pi_{xx})_{p_m} & \ldots \mathfrak{Q}_m + (\Delta\Pi - \Pi_{xx})_0 & -(\Pi_{xy})_m & \ldots & -(\Pi_{xz})_0 \\ -(\Pi_{xy})_0 & \ldots -(\Pi_{xy})_{p_m} & \mathfrak{Q}_1 + (\Delta\Pi - \Pi_{yy})_0 \ldots & & -(\Pi_{yz})_{p_m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ -(\Pi_{xz})_{p_m} & \ldots -(\Pi_{xz})_0 & -(\Pi_{yz})_{p_m} & \ldots \mathfrak{Q}_m + (\Delta\Pi - \Pi_{zz})_0 \end{vmatrix} = 0.$$

Für die Ausbreitung längs der z-Axe ist nur noch $\Pi_{xy} = \Pi_{xz} = 0$, wenn jeder Punkt des Systems in einer zu z senkrechten Symmetrieebene liegt. Nehmen wir diesen Fall an, so zerfällt die

3 m-reihige Determinante und es genügt, wenn die aus den ersten m-Gliedern gebildete Determinante verschwindet. Wir erhalten aus ihr ν_x; setzen wir

$$5) \qquad N = \frac{\nu_x^2}{1-\nu_x^2}, \quad a_{ii} = \Omega_i \cdot \frac{v}{4\pi} + (\Delta\psi - \psi_{xx})_{p_i} - p_i$$
$$a_{ih} = (\Delta\psi - \psi_{xx})_{p_i} - p_h,$$

wo ψ wie in § 8 die von ν unabhängigen Teile der Potentiale bedeuten. Die Determinante ist

$$6) \qquad \begin{vmatrix} N+a_{11} & N+a_{12} \dots N+a_{1m} \\ \vdots & \vdots \\ N+a_{m1} & N+a_{m2} \dots N+a_{mm} \end{vmatrix} = 0$$

und man erhält durch einfache Umformungen

$$7) \qquad \frac{\nu^2}{1-\nu^2} = N = (-1)^m \cdot \frac{\Delta_1}{\Delta_2},$$

wo

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} a_{11}-a_{12} & a_{12}-a_{13} \dots a_{1,m-1}-a_{1,m} & a_{1m} \\ a_{21}-a_{22} & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1}-a_{m2} & & a_{m,m} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 1 & a_{11}-a_{22} & a_{12}-a_{13} \dots a_{1,m-1}-a_{1,m} \\ 1 & a_{21}-a_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & a_{m1}-a_{m2} & a_{m,m-1}-a_{mm} \end{vmatrix}.$$

Durch diese Formel ist die Berechnung des Brechungsindex für ein beliebig kompliziertes Punktsystem der bezeichneten Art im Prinzip gelöst. In besonderen Fällen lassen sich die Formeln durch Symmetriebetrachtungen von vornherein bedeutend vereinfachen. Immerhin erfordert die Berechnung eines aus mehreren Ionenarten bestehenden Punktsystems im allgemeinen fast die ganze in diesem § durchgeführte Rechnung. Die Aussicht, aus den optischen Eigenschaften der Kristalle auf diesem Wege auf ihre Struktur schließen zu können, ist somit gering.

Note 1 zu Seite 20.

Es handelt sich bei der Summation des Gesamtpotentials auf S. 20 darum, die 3 Summen

$$\sum_0^\infty{}^l e^{2ial(\lambda-\alpha)}, \quad \sum_0^\infty{}^m e^{2ibm(\mu-\beta)}, \quad \sum_0^\infty{}^n e^{2icn(\nu-\gamma)}$$

gleichzeitig konvergent zu machen, indem $\lambda\mu\nu$ geeignet geführt werden. Zur Konvergenz müssen die imaginären Teile

$$\lambda_2 > \alpha_2 \quad \mu_2 > \beta_2 \quad \nu_2 > \gamma_2$$

sein, wo $\alpha^2+\beta^2+\gamma^2 = k^2$. Andrerseits darf der Nenner des Integranden

$$k_0^2 - (\lambda^2+\mu^2+\nu^2)$$

nicht Null werden. Wir sahen in § 3, daß um die Summe von Einzelpotentialen absolut konvergent zu machen, die Bedingung $k_{02} > k_2$ genügt. Es fragt sich nun, ob unter alleiniger Voraussetzung von $k_{02} > k_2$ Wege für $\lambda\mu\nu$ angegeben werden können, sodaß die Summen wirklich konvergieren.

Lassen wir die Variabeln auf Parallelen zur reellen Axe laufen, die im Abstande λ_2, μ_2, ν_2 liegen. Die Kurven λ^2 etc. sind Parabeln, welche die positive reelle Axe umschließen. Wir fragen zunächst nach dem Gebiet der Werte von $\lambda^2+\mu^2$; zu dem Zwecke denken wir uns die μ^2-Ebene mit ihrem Nullpunkt auf der λ^2-Kurve in der λ^2-Ebene verschoben. Bei jedem reellen Werte r wird die Ordinate von der reellen Axe bis zur μ^2-Kurve dann ein Maximum erreichen, wenn der Nullpunkt der μ^2-Ebene eine bestimmte Abszisse r_1 in der λ^2-Ebene hat. Wird nämlich die μ^2-Kurve vorbeigeschoben, so muß der Zuwachs der Ordinate in r infolge des Anstieges von λ^2 an der Stelle r, gerade durch den Abfall der Kurve μ^2 bei ihrer Abszisse $(r-r_1)$ aufgehoben werden. Das heißt, wenn J und $\Re$ imaginären und reellen Teil bedeuten:

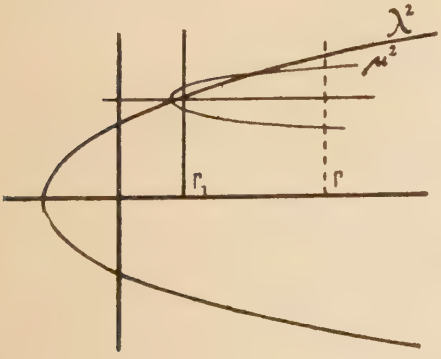

Fig. 5.

$$\left[\frac{\partial J(\lambda^2)}{\partial \Re(\lambda^2)}\right]_{r_1} = \left[\frac{\partial J(\mu^2)}{\partial \Re(\mu^2)}\right]_{r-r_1}$$

oder da λ_2 und μ_2 konstant sein sollen, bei Eintragung der Werte:

$$\left[\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right]_{r_1} = \left[\frac{\mu_2}{\mu_1}\right]_{r-r_1},$$

$$\frac{\lambda_2}{\sqrt{r_1+\lambda_2^2}} = \frac{\mu_2}{\sqrt{r-r_1+\mu_2^2}},$$

woraus

$$r_1 = \frac{\lambda_2^2 r}{\lambda_2^2+\mu_2^2}, \quad r-r_1 = \frac{\mu_2^2 r}{\lambda_2^2+\mu_2^2}$$

folgt. Das Maximum selbst, also die Grenzkurve des Gebietes $\lambda^2+\mu^2$, hat die Gleichung

$$[2\lambda_1\lambda_2]_{r_1} + [2\mu_1\mu_2]_{r-r_1} = 2\sqrt{r+\lambda_2^2+\mu_2^2}\,\sqrt{\lambda_2^2+\mu_2^2} = g(r).$$

Ebenso verfährt man, um die Grenzkurve des Gebietes $\lambda^2+\mu^2+\nu^2$ aufzusuchen: $g(r)$ tritt dabei an die Stelle der Funktion λ^2. Es ergibt sich, daß die Werte von $\lambda^2+\mu^2+\nu^2$ liegen unterhalb

$$f(r) = 2\sqrt{r^2+\lambda_2^2+\mu_2^2+\nu_2^2}\,\sqrt{\lambda_2^2+\mu_2^2+\nu_2^2}.$$

Diese Grenzkurve geht *unterhalb* des Punktes k_0^2 vorbei, wenn $(\lambda_2, \mu_2, \nu_2) > (\alpha_2, \beta_2, \gamma_2)$ gewählt werden und $k_{02} > k_2$ ist:

$$f(k_{01}^2 - k_{02}^2) < 2\,k_{01}\,k_{02}.$$

Um dies zu zeigen, setzen wir

$$\lambda_2^2+\mu_2^2+\nu_2^2 = k_2^2+\delta$$

und ferner

$$k_{02}^2 - k_2^2 = \eta.$$

Dann ist

$$\begin{aligned} f(k_{01}^2-k_{02}^2) &= 2\sqrt{k_{01}^2-k_{02}^2+k_2^2+\delta}\,\sqrt{k_2^2+\delta} \\ &= 2\sqrt{k_{01}^2-\eta+\delta}\,\sqrt{k_2^2+\delta} \end{aligned}$$

und hierin kann bei gegebenem η das δ durch Wahl der Wege so klein gemacht werden, daß tatsächlich dieser Ausdruck kleiner ist als $2k_{01}k_{02}$, die Ordinate von k_0^2.

Die Bedingung $k_{02} > k_2$ genügt also wirklich in allen Fällen zur unbedingten Konvergenz der Reihen.

Lebenslauf.

Am 23. Januar 1888 wurde ich als Sohn des verstorbenen Privatdozenten der Geschichte Paul Ewald in Berlin geboren. Ich besuchte das Kgl. Wilhelmsgymnasium in Berlin und das Kgl. Viktoriagymnasium in Potsdam, das ich Michaeli 1905 mit dem Reifezeugnis verließ. Sodann studierte ich 1 Semester in Cambridge, 3 in Göttingen und 9 in München, indem ich mathematischen, physikalischen, astronomischen und krystallographischen Vorlesungen beiwohnte.

Ganz besonders verpflichtet fühle ich mich den Herren Hilbert und Pringsheim für die mathematische, Herrn Sommerfeld für meine physikalische Ausbildung. Herrn Sommerfeld verdanke ich auch die Anregung zu diesem Thema und ihm sowie seinen früheren Assistenten, Herrn P. Debye, wertvolle Förderung bei der Bearbeitung. Ich kann es deshalb nicht unterlassen, sie an dieser Stelle meiner Dankbarkeit und Verehrung zu versichern.